



Ineris - 178310 - 1965433 - v2.0

16/03/2021

Méthodes pour l'évaluation et la prévention des risques accidentels

Dispersion atmosphérique (mécanismes et outils de calcul) - Ω 12

PRÉAMBULE

Les rapports Oméga sont la propriété de l'INERIS. Il n'est accordé aux utilisateurs qu'un droit d'utilisation n'impliquant aucun transfert de propriété.

Le rapport Oméga est établi sur la base des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur, ainsi que des pratiques et méthodologies développées par l'INERIS. Bien que l'INERIS s'efforce de fournir un contenu fiable, il ne garantit pas l'absence d'erreurs ou d'omissions dans ces documents.

Ce rapport est destiné à des utilisateurs disposant de compétences professionnelles spécifiques dans le domaine des risques accidentels. Les informations qu'il contient n'ont aucune valeur légale ou réglementaire. Ce sont des informations générales et ne peuvent, en aucun cas, répondre aux besoins spécifiques de chaque utilisateur. Ces derniers seront donc seuls responsables de l'utilisation et de l'interprétation qu'ils feront des rapports. De même, toute modification et tout transfert de ces documents se fera sous leur seule responsabilité.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra, en aucun cas, être engagée à ce titre. En toute hypothèse, la responsabilité de l'INERIS ne pourra être retenue que sur la base de la version française de ces rapports.

Nom de la Direction en charge du rapport : Direction Incendie, Dispersion, Explosion

Rédaction : LACOME Jean-Marc

Vérification : TRUCHOT BENJAMIN; PRATS FRANCK

Approbation : DUPLANTIER STEPHANE - le 16/03/2021

Liste des personnes ayant participé à l'étude :

Table des matières

1	Introduction	7
1.1	Les référentiels OMEGA.....	7
1.2	Contexte et objectif du document.....	7
1.3	Structure du document	8
1.4	Modifications apportées à la précédente version (2002)	8
2	Quelques accidents remarquables où sont apparus des phénomènes de dispersion de produits toxiques/inflammables	9
2.1	Des accidents industriels majeurs.....	9
2.1.1	L'accident de Seveso : rejet à l'atmosphère de dioxines dans une usine chimique	9
2.1.2	Fuite de isocyanate de methyl (MIC) à Bhopal (INDE)	10
2.1.3	Incendie du dépôt pétrolier de Buncefield (Angleterre).....	10
2.2	Dispersion atmosphérique lors d'un incendie : accident de Somerset West (Afrique du Sud) survenu le 17/12/1995	11
2.3	Accidents impliquant des gaz liquéfiés.....	11
2.3.1	Déraillement de train transportant de l'ammoniac liquéfié (Crete, Nebraska, U.S.A, 1969)	11
2.3.2	Renversement d'un camion transportant de l'ammoniac liquéfié sur autoroute (Houston, Texas, U.S.A, 11 Mai 1976)	12
2.3.3	Accident lors d'un déchargement de wagon de chlore (Festus, Missouri, U.S.A, 2002)	12
2.3.4	Collision de train transportant du chlore liquéfié (Macdona, Texas, U.S.A 2004).....	12
2.4	Accidents de fuites toxiques	13
2.4.1	Fuite de trichlorosilane – Etats-Unis – Juin 2000	13
2.4.2	Tragédie du Lac de Nyos (Cameroun, 1986, relargage de CO ₂).....	13
2.4.3	Réactions chimiques incontrôlées (Lubrizon, 2013).....	13
2.5	Enseignements sur le retour d'expérience des phénomènes observés	14
3	Description du périmètre d'étude des phénomènes dangereux et des situations accidentelles concernées	15
3.1	Principales situations accidentelles industrielles étudiées	15
3.2	Contexte d'utilisation des modèles.....	16
3.3	Les effets sur l'homme et sur l'environnement.....	16
4	Mécanismes Physiques.....	18
4.1	Conditions météorologiques et écoulement dans la CLA	18
4.1.1	Structure de l'atmosphère.....	18
4.1.2	Echelle des mouvements atmosphériques.....	20
4.1.3	Structure de la turbulence atmosphérique à petite échelle	22
4.1.4	Stabilité atmosphérique et conditions météorologiques	26
4.2	Environnement	28
4.2.1	Effets mécaniques	28
4.2.2	Changement de rugosité	28
4.2.3	Topographie accentuée.....	29
4.2.4	Obstacle.....	30
4.2.5	Effets thermiques.....	31

4.3	Conditions de rejet et écoulement aux abords de l'émission accidentelle	32
4.3.1	Etat physique initial du produit toxique/inflammable	32
4.3.2	Mode d'émission dans l'atmosphère libre	32
4.3.3	Réactivité chimique dans l'atmosphère	33
4.3.4	Dépôt au sol.....	34
4.4	Interaction entre les mécanismes de rejets et de l'écoulement atmosphérique	35
4.4.1	Principaux phénomènes de dilution.....	35
4.4.2	Dilution du nuage – Entraînement de l'air	36
4.4.3	Interaction nuage - relief – obstacle	40
5	Recensement d'outils de calculs pour simuler la dispersion atmosphérique d'un produit toxique/inflammable.....	42
5.1	Modèles gaussiens	44
5.1.1	Domaine d'application des modèles gaussiens	44
5.1.2	Formulation.....	44
5.1.3	Quelques recommandations.....	49
5.2	Modèles intégraux	50
5.2.1	Domaine d'application	50
5.2.2	Formulation générale.....	50
5.2.3	Paramétrisation des équations	51
5.2.4	Prise en compte de la turbulence atmosphérique	53
5.3	Modèles eulériens CFD basés sur les équations de Navier -Stokes	53
5.3.1	Notions fondamentales de turbulence	53
5.3.2	Théorie physique, approches mathématiques et adaptation aux écoulements atmosphériques	55
5.3.3	Domaine d'application	58
5.4	Modèles de dispersion lagrangien à particules	59
5.4.1	Formulation.....	59
5.4.2	Domaine d'application	60
5.5	Modèles Lattice-Bolzman	60
6	Modélisation de l'intermittence dans un nuage toxique/inflammable	61
6.1	Introduction	61
6.2	Illustration du caractère intermittent	61
6.3	Formulation.....	63
7	Comment évaluer des modèles de dispersion atmosphérique ?	65
7.1	Historique des protocoles d'évaluations et d'harmonisation des modélisations	65
7.2	Comparaisons modèles / expérimentations : quelques illustrations	65
7.3	Analyse critique sur les évaluations de modèles et nouveau protocole.....	66
8	Conclusion et domaine d'application des modèles	68
9	Références	70
10	Annexes.....	78
1	Formulation des écarts-types	82
1.1	Rejet instantané.....	82
1.2	Rejet continu – Modèle « panache ».....	83

1.3	Source ponctuelle	87
1.4	Rugosité.....	88
2	Ecarts-types et « averaging time »	91
3	Convertir des informations météorologiques en classe de Pasquill.....	94

Figure 1	: Evolution schématique de la CLA au cours de la journée (d'après [43] cité par [44]). La couche limite dans les régions de hautes pressions consiste en 3 parties : une couche de mélange très mélangée, une couche résiduelle moins-turbulente et une couche stable	18
Figure 2	: Décomposition schématique de la couche limite atmosphérique (d'après [17]).....	19
Figure 3	: Spectre énergétique de la vitesse du vent selon Van der Hoven [20].....	22
Figure 4	: Comparaison entre le gradient de température de l'atmosphère et le gradient thermique de l'adiabatique	23
Figure 5	: Illustration de l'instabilité (a) et de la stabilité (b) et atmosphérique	24
Figure 6	: Relation entre la longueur de Monin-Obukhov L et la rugosité z_0 pour différentes classes de stabilité de Pasquill (issu de [47]).....	26
Figure 7	: Absorption du rayonnement solaire dans la couche limite atmosphérique.....	27
Figure 8	: Ecoulement sur une surface à rugosité variable d'après [17].....	29
Figure 9	: Ecoulement au-dessus d'une colline selon Turbelin [17].....	30
Figure 10	: Ecoulement en présence d'un obstacle isolé selon Turbelin [17].....	31
Figure 11	: Influence d'un obstacle sur l'écoulement du vent selon Hug [25] ci-dessous	31
Figure 12	: Schéma de perte du confinement de réservoir, projections de fragments et développement d'un nuage	32
Figure 13	: Photographie d'un rejet continu d'ammoniac [15] (Crédit Ineris).....	33
Figure 14	: Photographie (a) d'un nuage de gaz dense [15](Crédit INERIS) et iso concentration à 500 ppm (b) dans le nuage modélisé par CFD [30]	37
Figure 15	: Illustration de l'influence des tourbillons turbulents sur la dispersion d'un panache continu (issu des travaux expérimentaux de traçage de Mylne [32] ; réimprimé avec l'autorisation de Boundary-Layer Meteorology 60: 15-48, 1992 © et de Mylne K.R.).....	39
Figure 16	: Dispersion d'une bouffée de produits transportée par l'air, dans trois conditions de turbulence selon Bakkum [34])	40
Figure 17	: Classification des modèles mathématiques déterministes de dispersion atmosphérique pour l'étude de rejets accidentels	43
Figure 18	: Répartition gaussienne de la concentration dans un panache de gaz passif (Turner, [50])	45
Figure 19	: Evolution des écarts types suivant la Théorie de Taylor.....	47
Figure 20	: Distribution spectrale de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation scalaire en fonction du nombre d'onde.....	54
Figure 21	: Représentation schématique de l'évolution d'une grandeur physique (ϕ) au cours du temps (t) selon les différentes modélisations de la turbulence	55
Figure 22	: Série de mesures de concentration mesurées dans un panache (issue de Mylne, [127]) ..	62
Figure 23	: (issu de l'Office of the Federal Coordinator for Meteorology) définition des échelles météorologiques et des différents processus atmosphériques avec les temps caractéristiques et les échelles horizontales (adapté de Orlanski, I., 1975: A rational subdivision of scales for atmospheric processes. Bull. Amer. Meteor. Soc., 56, 527–530.) (C.A.T. "Clear Air Turbulence", I.G.W. : "Inertial Gravity Waves").....	80
Figure 24	: Coefficient de dispersion horizontale et verticale en fonction de la distance (d'après [57])	85
Figure 25	: Représentation des limites d'un panache en fonction du temps d'intégration d'après Seinfeld [62].....	91

Résumé

Ce document présente les phénomènes physiques de la dispersion atmosphérique de gaz toxique ou inflammable ainsi que les familles de modèles visant à les représenter et en estimer les effets.

Les principaux facteurs influençant la dispersion atmosphérique sont :

- les conditions de rejet (gaz sous pression ou non, gaz liquéfié, ...) qui définissent le terme source ;
- l'environnement dans lequel se disperse le nuage : l'occupation du sol, les obstacles (bâtiments industriels, lotissements...), le relief naturel ;
- et les conditions météorologiques et l'écoulement atmosphérique près du sol influencé prioritairement par le vent et l'état de stabilité de l'atmosphère (forte stabilité, instabilité, ...).

La dispersion atmosphérique est une résultante de la combinaison de ces facteurs et phénomènes physiques qui sont fortement interreliés.

Une large gamme de familles de modèles numériques de dispersion atmosphérique adaptés aux rejets accidentels existe et une synthèse descriptive théorique est présentée dans ce rapport ; modèles types intégraux ou gaussien, CFD eulérien et LPDM.

Les guides de bonnes pratiques relatifs à chacun des familles modèles s'ils existent sont référencés.

Une analyse critique de l'évaluation des modèles et une revue des protocoles d'évaluations dans le cadre de scénarios accidentels est réalisée.

Une synthèse des domaines d'applications pour chacune des familles de modèles est également présentée.

Pour citer ce document, utilisez le lien ci-après :

Institut national de l'environnement industriel et des risques, , Verneuil-en-Halatte : Ineris - 178310 - v2.0, 16/03/2021.

Mots-clés :

Référentiel Omega – Dispersion atmosphérique-Modèles gaussien-Modèles intégraux- Modèles CFD

1 Introduction

1.1 Les référentiels OMEGA

Les référentiels OMEGA (Ω) constituent un recueil global formalisant l'expertise de l'INERIS dans le domaine des risques accidentels. Ce recueil concerne les thèmes suivants :

- l'analyse des risques ;
- les phénomènes physiques impliqués en situation accidentelle (incendie, explosion, BLEVE, dispersion atmosphérique...);
- la maîtrise des risques d'accident ;
- les aspects méthodologiques pour la réalisation de prestations réglementaires (étude de dangers, analyse critique, ...).

Ces rapports ont vocation à présenter les connaissances considérées comme consolidées au moment de leur rédaction. Ces rapports sont mis à disposition des acteurs de la maîtrise des risques d'accidents qui en feront bon usage sous leur responsabilité. Certains de ces rapports sont traduits en anglais en vue d'en favoriser leur diffusion. Les concepts exposés dans ces rapports n'ont pas vocation à se substituer aux dispositions réglementaires.

1.2 Contexte et objectif du document

Le présent rapport référencé Ω -12 présente la démarche adoptée par l'INERIS pour l'étude de la dispersion atmosphérique, un des sujets retenus dans le thème « phénomènes physiques » cité ci-dessus. Il s'inscrit dans une démarche de dissémination et de valorisation du savoir-faire de l'INERIS auprès des pouvoirs publics, des industriels et du public.

Le présent document présente des méthodes et outils permettant de prendre en compte les effets de la dispersion atmosphérique d'un produit toxique ou inflammable.

Il a pour objectifs :

- de présenter les mécanismes physiques relatifs aux rejets atmosphériques accidentels ;
- de recenser les familles de modèles de dispersion atmosphériques de différentes natures ;
- d'aider, de manière opérationnelle, les rédacteurs à appréhender le domaine d'application des modèles ;
- d'orienter le lecteur vers les guides de bonnes pratiques pour utilisation correcte des modèles,

en s'appuyant sur :

- l'état des lieux des modèles existant au niveau national voire international ;
- les connaissances et les pratiques actuelles de l'INERIS sur ce sujet, que ce soit au niveau de la phénoménologie et de l'utilisation des modèles dans un cadre réglementaire ou autre ;
- une expérience et une analyse critique de l'évaluation des modèles.

Pour chaque point suscité il s'agira de donner des références afin que le lecteur souhaite aller plus loin. En effet, il existe une multitude de modèles pour estimer les conséquences d'un rejet accidentel atmosphérique toxique ou inflammable. Dans certains cas, cette estimation peut se faire selon plusieurs degrés de complexité. Le choix de la méthode est à l'appréciation de l'utilisateur, du cadre d'application et également de ses connaissances des phénomènes pouvant survenir.

1.3 Structure du document

Outre une liste des références bibliographiques (chapitre 9), une introduction (chapitre 1) et une conclusion (chapitre 8), le document est organisé autour des 7 chapitres principaux suivants :

- Chapitre 2 : Accidentologie.
- Chapitre 3 : Description du périmètre d'étude des phénomènes dangereux et des situations accidentelles concernées.
- Chapitre 4 : Mécanismes Physiques.
- Chapitre 5 : Recensement d'outils de calculs pour simuler la dispersion atmosphérique d'un produit toxique/inflammable.
- Chapitre 6 : Présentation du caractère intermittent d'un nuage toxique.
- Chapitre 7 : Comment évaluer des modèles de dispersion atmosphérique ?

1.4 Modifications apportées à la précédente version (2002)

Les principales évolutions par rapport à la précédente version sont les suivantes :

- un chapitre dédié à l'accidentologie ;
- une description plus détaillée des modèles de dispersion atmosphérique dits « tri-dimensionnels » ;
- une analyse critique des travaux d'évaluation des modèles dans le contexte de la prévention des risques accidentels industriels ;
- et des recommandations sur leur domaine d'application.

2 Quelques accidents remarquables où sont apparus des phénomènes de dispersion de produits toxiques/inflammables

L'objectif de ce chapitre est de :

- présenter quelques accidents caractéristiques du point de vue des dommages sur la santé de l'homme et l'environnement, dus à la dispersion atmosphérique d'un rejet atmosphérique toxique/inflammable ;
- de faire ressortir des enseignements qui sont apparus influents sur les phénomènes de dispersion atmosphérique des produits toxiques/inflammables au regard des observations in situ ;
- présenter les défis de modélisations associés.

2.1 Des accidents industriels majeurs

2.1.1 L'accident de Seveso : rejet à l'atmosphère de dioxines dans une usine chimique

Déroulement :

Extrait de de la base ARIA1 du BARPI :

« Le vendredi 9 juillet 1976, le cycle de production du 1,2,4,5 TCP est initié à 16 h, avec 10 h de retard par rapport aux conditions habituelles. Le samedi matin, à 5 h, le chauffage du réacteur est arrêté alors que seulement 15 % du solvant est distillé. L'agitation est stoppée 15 min plus tard et le réacteur est ramené à pression atmosphérique. Les opérateurs quittent leur poste à 6 h, laissant le réacteur sans surveillance pour le week-end. A 12h30, soit 6h30 plus tard, le disque de sécurité du réacteur, taré à 3,8 bars, se rompt à la suite d'une augmentation de la température et de la pression dans le réacteur. Un nuage rougeâtre s'échappe à l'atmosphère par la cheminée du bâtiment, le panache s'élevant à plusieurs mètres de hauteur. Le rejet gazeux contenant de la dioxine (2,3,7,8 tetrachlorodibenzodioxine (TCDD)) perdure environ 1 h : l'intervention rapide du chef d'atelier se trouvant par hasard à proximité de l'usine lors de l'accident a permis d'en limiter la durée. Selon les différentes études, la quantité estimée de dioxine rejetée à l'atmosphère est comprise entre 0,2 et 40 kg.

Compte tenu de la hauteur du panache d'émission et de la direction du vent soufflant à 4 m/s, le nuage toxique se répand au sud-est de l'usine, affectant une zone principalement agricole.

Le lendemain des faits, les premiers effets de l'accident sont constatés : quelques enfants présentant des troubles intestinaux et de fortes fièvres, végétation brûlée, petits animaux atteints. Les responsables de l'usine informent les autorités qu'un « nuage d'herbicides pouvant créer des dommages à l'agriculture » a été rejeté à l'atmosphère.

Les riverains proches de l'usine seront avertis 2 jours après l'accident de ne pas consommer les produits de leur jardin.

Quatre jours après l'accident, les premiers symptômes de brûlure apparaissent sur la peau d'enfants et de petits animaux décèdent.

6 jours après, 15 enfants sont hospitalisés dont 4 dans un état grave, mais les médecins ignorent quelle thérapie appliquer. Une grève est décidée, les habitants, angoissés, font pression sur les autorités pour être informés.

1 Analyse, Recherche et Information sur les Accidents – Base de données d'accidents industriels du ministère de l'environnement français - <https://www.aria.developpement-durable.gouv.fr/le-barpi/la-base-de-donnees-aria/>

Ce n'est que 10 jours après l'accident que le groupe chimique annonce publiquement la présence de dioxine dans le nuage toxique.

Finalement, 11 communes sont atteintes et les autorités définissent 3 zones de contamination ... »

Selon [7], le produit a été libéré accidentellement dans l'atmosphère durant au minimum 20 minutes et le dépôt du nuage toxique a affecté une zone de 18 km² environ occupée par 37235 habitants.

Enseignements :

Il s'agit d'un accident majeur industriel qui a participé à la prise de conscience des risques industriels et à la création en 1982 de la Directive dite « SEVESO » relative à la prévention des accidents chimiques majeurs sur un site industriel.

L'investigation [6] après accident montre la difficulté à établir un listing des produits réellement émis du fait de la présence de produits issus des réactions intermédiaires. Il s'agit d'un mélange de produits dont la toxicité et l'impact sur la santé de l'homme est difficile à appréhender. Une étude de dispersion [10] montre des conditions jugées turbulentes et une haute variabilité de la direction du vent du fait d'une topographique marquée et des effets de « convection thermique » (cf. chapitre 4).

2.1.2 Fuite de isocyanate de methyl (MIC) à Bhopal (INDE)

Déroulement :

Dans la nuit du 2 au 3 décembre 1984 à Bhopal (Inde), sur le site de Union Carbide Ltd, une réaction de corrosion dans un réservoir catalyse de manière incontrôlée la réaction de trimérisation exothermique du MIC. L'élévation subite de température et de pression à l'intérieur du réservoir entraîne l'ouverture de la valve de sécurité conduisant au rejet de 40 t de MIC dans l'atmosphère en 90 min. par une conduite verticale, de 20 cm de diamètre, à une élévation d'environ 33 m. Une zone de 50 km² a été impactée et à peu près 200 000 personnes furent affectées. En effet le MIC est extrêmement toxique pour l'homme et la végétation ; la valeur du seuil toxique des effets létaux (ERPG-3²) est de 1 ppm.

Enseignements :

Il s'agit d'un des accidents industriels majeurs. Les travaux de modélisation de la dispersion atmosphérique Havens et al. (2012) [1], destinés à l'étudier le comportement du nuage toxique montre :

- un comportement de dispersion de nuage lourd. En effet, cet auteur estime la densité du mélange 3 fois supérieure à celle de l'air. Le produit rejeté n'est pas un produit purement gazeux mais d'un mélange de différentes formes polymérisées d'isocyanate de méthyl chargé en aérosol humide.
- l'influence des conditions météorologies de nuit susceptibles d'être peu favorables à la dispersion atmosphérique et qualifiées de « stable ».

2.1.3 Incendie du dépôt pétrolier de Buncefield (Angleterre)

Déroulement :

Le dépôt pétrolier de Buncefield, cinquième plus grand de Grande-Bretagne, est situé à 40 km au nord de Londres, près de Hemel Hempstead, dans le comté du Hertfordshire. A partir de 19 h le 10 décembre 2005, un bac à écran flottant reçoit de l'essence sans plomb par pipeline à un débit de 550 m³/h. Le 11 décembre, à minuit, le terminal est fermé et le contrôle des stocks est en cours. A 5h20, le bac commence à déborder et un mélange riche air/carburant se forme. A 6h01 a lieu la première et la plus importante explosion, suivie d'un incendie qui embrase 21 grands réservoirs. Il s'agit de l'explosion principale, qui se produit au niveau de parkings. L'explosion est entendue jusqu'à 160 km. Les services géologiques britanniques classent les effets sismiques au niveau 2.4 sur l'échelle de Richter. A 6h08, les secours sont alertés. A 6h27 et 6h28, deux explosions subséquentes se produisent. Le 12

² Emergency Response Planning Guidelines

décembre, à 12 h, le feu est à son maximum. Les pompiers attaquent l'incendie le 12 décembre à 8h20 à l'aide de 6 pompes haute pression capables de projeter 32 000 l d'eau et d'émulseur par minute. En quelques heures, alors que la moitié des cuves sont embrasées, ils parviennent à maîtriser l'extension de l'incendie

Enseignements :

L'enquête après accident [2] montre (analyse de vidéos de surveillance) qu'il y a eu une dispersion d'un nuage inflammable, formé de gaz et de gouttelettes, généré par le déversement d'hydrocarbures depuis le bac, dans des conditions (relevés in situ) atmosphériques stables et de vent faible. Ces conditions ont généré la dispersion d'un nuage occupant une grande surface au sol mais limitée à quelques mètres seulement en hauteur.

2.2 Dispersion atmosphérique lors d'un incendie : accident de Somerset West (Afrique du Sud) survenu le 17/12/1995

Déroulement :

Le résumé de la base de données ARIA du MEDD/SEI/BARPI de cet accident qui est survenu à SOMERSET WEST (Afrique du Sud) le 17 décembre 1995, est retranscrit ci-dessous :

« Suite à un feu de broussailles attisé par un fort vent et qui saute deux zones coupe-feu, un stock gouvernemental de 15 000 t de soufre (superficie du stock : 1,5 ha) s'enflamme et crée un nuage de SO₂, contribuant au décès de deux personnes et conduisant à l'hospitalisation d'une centaine de personnes dans la ville de Macassar. Les pluies acides qui s'ensuivent endommagent gravement les cultures de fruits et de légumes. Le sinistre est éteint notamment par des largages d'eau par deux hélicoptères. 3 000 personnes sont évacuées. ».

Enseignements :

Il s'agit de l'unique accident recensé de type incendie ayant conduit à des décès, hormis les conséquences d'incendie issues de faits de guerres([8],[9]).

Parmi les spécificités, on peut relever d'après les travaux de [11]:

- la surface de rejet de polluants est étendue;
- le panache de fumée s'élève dans l'atmosphère du fait de la flottabilité et de la quantité de mouvement. La hauteur à laquelle se dispersent les fumées toxiques est appelée couramment « sur hauteur ». Ce paramètre dépend de la surface de l'incendie, de la température, du volume de gaz émis, de la météorologie, et de la topographie.

2.3 Accidents impliquant des gaz liquéfiés

2.3.1 Déraillement de train transportant de l'ammoniac liquéfié (Crete, Nebraska, U.S.A, 1969

Description :

Suite à un déraillement de train, un wagon [3] libère 110,5 m³ d'ammoniac qui tue immédiatement 5 personnes et blesse 28 autres. Des personnes furent impactées mortellement, et de manière immédiate, jusqu'à des distances de 100 m environ depuis le wagon et des employés furent également impactés lorsque le nuage atteignit une distance de 400 m. En raison de l'inversion thermique et du faible vent, le nuage de produit génère un brouillard durant un long moment. Entre 200 et 300 personnes furent évacuées avec difficulté.

Analyse :

Il est à noter :

- les conditions peu favorables à la dispersion, soit un vent faible et un cas d'« inversion thermique » qui peut expliquer le délai de dissipation du nuage ;
- les conséquences très rapides dues à la forte toxicité d'un nuage concentré.

2.3.2 Renversement d'un camion transportant de l'ammoniac liquéfié sur autoroute (Houston, Texas, U.S.A, 11 Mai 1976)

Description :

Un camion quitte l'autoroute et tombe en contrebas sur une autre autoroute libérant 28,4 m³ d'ammoniac (Highway Safety Board NTSB-HAR-77-1). Six personnes furent victimes d'inhalation toxique, 78 furent hospitalisés et approximativement 100 autres personnes furent soignées pour blessure. La journée était ensoleillée avec des températures autour de 25°C et un vent de 3 m/s. L'ammoniac rejeté se vaporise et le vent diminue la concentration au niveau du sol. Les témoins rapportent que les vapeurs blanches du nuage d'ammoniac atteignent initialement une hauteur de 30 m avant d'être transportées par un vent de 3 m/s sur une distance de 800 m environ. Dans les trois minutes de rejet, le maximum de la largeur du nuage de vapeur au-dessus du sol était de 300 m, se réduisant jusqu'à une distance de 800 m en aval. Après 5 minutes, la plupart du liquide s'est évaporé par ébullition et le nuage de vapeur a complètement disparu.

Analyse :

Il est à noter la formation très rapide, du fait d'un rejet massif instantané, d'un nuage ou brouillard de grande dimension (hauteur d'une trentaine de mètres) au comportement « rampant » et qui a dérivé sur quelques centaines de m. On peut noter également l'évaporation rapide du liquide répandu au sol.

2.3.3 Accident lors d'un déchargement de wagon de chlore (Festus, Missouri, U.S.A, 2002)

Déroulement :

Lors d'un déchargement d'un wagon de chlore [4], stocké sous forme de gaz liquéfié à température ambiante, un flexible de 1 pouce se déchire conduisant à un épandage de chlore. Un nuage visible de chlore gazeux, d'une hauteur d'environ 1 m et d'une largeur d'environ 20 ou 30 m se répand autour du wagon où se situaient des bâtiments de hauteur moyenne et des racks. Il s'est avéré qu'une partie seulement du système de sécurité a fonctionné et le dépotage s'est alors maintenu à un rythme soutenu. Environ 24 tonnes de chlore ont été déversées accidentellement. La fuite a été jugulée par une intervention d'urgence 3 h après le début du rejet. Un total de 63 personnes dans la communauté environnante a nécessité une assistance médicale en raison de l'exposition par inhalation au chlore. De plus, le brunissement des feuilles d'arbres et d'autres végétaux autour de l'installation a été observé dans le sillon du panache.

Enseignements :

Le rejet accidentel est décrit comme un rejet continu durant 3 h. Cela peut s'expliquer par le refroidissement du produit qui accompagne la décompression brutale puis l'évaporation du produit, depuis le réservoir ou de la flaque éventuelle formée au sol.

2.3.4 Collision de train transportant du chlore liquéfié (Macdona, Texas, U.S.A 2004)

Déroulement :

Une collision de deux trains entraîne le déraillement de 45 locomotives et 35 wagons, ce qui génère un rejet accidentel de 60 T de chlore mais aussi de produit fertilisant. Le rejet toxique causa la mort de 5 personnes et 29 personnes furent blessées par inhalation toxique ou/et par d'autres effets dus à la collision et au déraillement.

Enseignements :

D'après Hanna [5], le rejet a consisté en un rejet massif et diphasique car formé de gouttelettes liquides (la fraction massique de liquide > 50%) dans les trois premières minutes, suivi par un rejet gazeux sur une durée beaucoup plus longue.

2.4 Accidents de fuites toxiques

2.4.1 Fuite de trichlorosilane – Etats-Unis – Juin 2000

Déroulement :

La base ARIA du BARPI a recensé l'incident suivant, qui n'a pas eu de conséquences significatives. Dans une usine chimique, une fuite de 10 l de trichlorosilane s'est produite lors du transfert de la substance d'une capacité de stockage à une autre. Un nuage irritant de chlorure d'hydrogène s'est formé au contact de l'humidité de l'air, puis s'est dispersé. Les autorités ont décidé de demander aux habitants à proximité du lieu de l'incident de se confiner afin de ne pas subir d'effets toxiques.

Enseignements :

Le produit est réactif avec l'eau et semble avoir réagi chimiquement avec l'humidité de l'air.

2.4.2 Tragédie du Lac de Nyos (Cameroun, 1986, relargage de CO₂)

Déroulement :

Une chute de roches aux abords du lac Nyos³ au Cameroun en 1986 génère le relargage de 240 000 tonnes de CO₂ d'origine profonde, de ce lac volcanique, qui se sont dispersées sur 14 km aux alentours. Du fait du caractère lourd, soit une fois et demie plus lourd que l'air, le CO₂ s'est répandu au niveau du sol et accumulé dans les vallées confinées provoquant la mort par asphyxie de 1700 personnes et de dizaines de milliers d'animaux.

Enseignements :

Le comportement de type gaz lourd du CO₂ lors de sa dispersion dans les vallées menant au lac est un aspect prépondérant lors de cette tragédie.

2.4.3 Réactions chimiques incontrôlées (Lubrizol, 2013)

Description :

Le 21 janvier 2013 sur le site de Lubrizol de Rouen, une instabilité des produits contenus dans le bac d'ajustage final de la fabrication du di-alkyl dithiophosphate de zinc (ZDDP) est constatée. Des rejets de composés soufrés ont été émis à l'atmosphère dans des proportions entraînant des nuisances olfactives [6]. Des plaintes de riverains invoquant de mauvaises odeurs, des maux de tête ou des nausées ont ainsi été recueillies par les centres antipoison et de toxicovigilance (CAPTV) et Air normand entre le 21 et le 22 janvier. Le panache a également été détecté à Paris dans la nuit du 21 au 22 janvier ainsi qu'au sud de Londres le 22 janvier dans la matinée.

Analyse :

Du fait d'un seul de détection olfactif très bas le panache émise d'une source ponctuelle a été détectée loin de la source, soit à une échelle qualifiée de régionale du point de vue météorologique [6].

³ http://fr.wikipedia.org/wiki/Lac_Nyos

2.5 Enseignements sur le retour d'expérience des phénomènes observés

Les enseignements issus des quelques accidents présentés dans ce chapitre montrent la large diversité des phénomènes qui peuvent survenir lors de rejets accidentels issus d'un site industriel et la complexité pour les appréhender, on peut citer :

- la nature des produits potentiellement toxiques : produit pur ou mélange de produits faiblement toxiques ou non toxiques (gène odorante), hautement toxique ; on a pu relever des conséquences très rapides dues à la forte toxicité aiguë d'un nuage concentré ou des effets olfactifs sur des distances importantes dû fait d'un seuil de détection olfactif très bas ;
- la nature de produits inflammables générant des nuages inflammables ;
- la géométrie de la source : fuite par un événement, formation d'une flaque au sol, rejet de grande surface (incendie), rejet en hauteur (fumées d'incendie, emballement de réaction,) , rejet massif de grande dimension (nuage diphasique) ;
- les fumées d'incendie ou les rejets de produits à faible densité volumique qui s'élèvent dans l'atmosphère ;
- le rejet de type gaz lourd tel ceux observés pour les rejets massifs de gaz liquéfiés. Le comportement de gaz lourds peut s'expliquer par 3 facteurs qui peuvent se conjuguer : l'aspect diphasique (présence de gouttelettes), le refroidissement dû à la décompression et la masse moléculaire du produit ;
- la réactivité chimique des produits dispersés avec l'atmosphère humide ;
- l'effet des conditions météorologiques : vitesse du vent et « stabilité atmosphérique » ;
- l'effet de la topographie.

Ces mécanismes physiques vont être décrits dans le chapitre 0.

Relativement aux défis de modélisations associés, en amont à la modélisation de la dispersion atmosphérique d'une substance, il convient de quantifier un « terme source », c'est-à-dire de caractériser le rejet de la substance étudiée vers l'air en termes de débit, température, état physique...L'étude des mécanismes physiques relatifs aux termes sources et l'étude des méthodes d'évaluation associées sont traitées dans le document « Ω -19 » (cf. [12]).

Le cas spécifique du terme source lié à l'incendie est traité dans le document « Ω -16 » et intitulé Toxicité et dispersion des fumées d'incendie - Phénoménologie et modélisation des effets [13].

Pour étudier la prise en compte de la toxicité lors d'une modélisation de rejets atmosphériques, le lecteur peut se reporter aux documents suivants :

- le rapport d'étude du 30/11/2010 référencé INERIS - N° DRA-10-109949-12423A DRC27-Opération e et intitulé « Bonnes pratiques pour l'utilisation des seuils de toxicité aiguë par inhalation dans le cadre des études réglementaires » ;
- le rapport d'étude du 19/12/2007 référencé INERIS - N°DRC-07-82347-07520A et intitulé « Méthodologie de détermination des valeurs seuils de toxicité aiguë françaises en cas d'émission accidentelle de substances chimiques dans l'atmosphère ».

3 Description du périmètre d'étude des phénomènes dangereux et des situations accidentelles concernées

Afin de définir le périmètre de cette étude, ce chapitre fournit :

- une identification et une définition des situations accidentelles industrielles ;
- le contexte d'utilisation des modèles présentés dans le présent rapport ;
- et les principales entrées et sorties des modélisations de rejet atmosphérique associées au contexte.

3.1 Principales situations accidentelles industrielles étudiées

Les principales situations de rejets accidentels susceptibles d'être rencontrées dans des configurations industrielles et pertinentes à traiter dans le cadre de cet OMEGA sont les suivantes :

- épandage et évaporation de liquide à température ambiante ;
- épandage et évaporation de liquide sous refroidi ;
- rupture de capacité ;
- rejet de gaz (fuite de gaz, rejet par un événement, rejet à l'extérieur d'un confinement,) ;
- rejet sous pression ;
- rejet diphasique avec production et dispersion d'aérosols ;
- dispersion de fumées d'incendie.

Les rejets peuvent être caractérisés en termes de durée de rejet :

- instantanée (rupture de capacité) ;
- de courte durée (maîtrise de la fuite par fermeture de vanne par exemple) ;
- de longue durée (rejet continu ou incendie).

Ces rejets peuvent aussi être distingués au travers de la densité (qui dépend de la température du produit) par rapport à l'air lors de leur libération dans l'atmosphère libre (lourd, léger ou neutre).

L'identification des situations possibles nécessite de caractériser leurs effets :

- directs : exposition et inhalation toxiques (quelques ppm à quelques %, dose toxique) , rejets chaud ou cryogéniques ;
- effets olfactifs ;
- indirects : inflammables ou comburants (de l'ordre du %) et formation d'un UVCE (« Unconfined Vapor Cloud Explosion ») ;
- asphyxiants (quelques % à 100%).

L'environnement immédiat du rejet tels que :

- des obstacles dans les unités de production ou les bâtiments ;
- les réseaux de canalisation ;
- ou des obstacles naturels.

peuvent avoir un impact sur la dispersion atmosphérique difficile à évaluer (accumulation, effet canyon, ...).

3.2 Contexte d'utilisation des modèles

Trois contextes d'utilisations seront concernés :

- le contexte de l'urgence avec des temps réponses rapides nécessaires pour les modélisateurs en vue d'apporter un appui aux services de secours ;
- la réalisation des Etudes de dangers⁴ avec l'estimation de distances d'effets relatives à des phénomènes dangereux dans le cadre de l'étude de scénario accidentels majeurs dits « enveloppes » ;
- le design de maillage de capteurs ;
- l'utilisation de modèles pour l'étude d'accidents passés (étude de cas).

Dans le cadre des 3 premiers contextes cités, la demande de premier ordre pour un outil de prédiction de la dispersion atmosphérique d'un nuage de produits toxiques ou inflammables est de prédire par modélisation, avec autant de précision que possible le champ de concentration dans le domaine d'étude considéré en fonction du temps. Ce résultat doit ainsi permettre d'identifier les distances d'effets pour les directions de vent jugées pertinentes et pour les différents seuils de toxicité ou d'inflammation ou bien encore de calculer le volume d'un nuage inflammable. Les distances d'intérêt sont au maximum de quelques kms.

Dans le contexte d'une étude d'accidents où des observations sur la santé de l'homme ou sur l'environnement ont été recueillies, la confrontation des sorties des modèles de dispersion atmosphérique avec ces observations permet de diagnostiquer la situation accidentelle à posteriori. On parle alors d'utilisation en mode diagnostic.

3.3 Les effets sur l'homme et sur l'environnement

Quel que soit le phénomène considéré (dispersion d'un gaz toxique ou inflammable), les conséquences d'un accident industriel sont entre autres quantifiées en termes de distances limites en deçà desquelles il pourrait être observé des effets sur la santé humaine irréversibles et létaux⁵.

Dans le cas d'un rejet de gaz inflammable, il faut apprécier :

- la distance où est atteinte la limite inférieure d'explosibilité (LIE) , celle où est atteinte la limite supérieure d'explosibilité (LSE) ;
- le niveau de turbulence dans le nuage inflammable ;
- ainsi que la masse de gaz inflammable (concentration comprise entre la LIE et LSE).

Dans le cas de personnes respirant une atmosphère polluée par un produit toxique par effet direct, les effets auxquels on s'intéresse habituellement sont définis comme étant l'apparition (à faible probabilité) de la létalité et des effets irréversibles sur la santé de l'homme. Ces effets sont directement fonction de la concentration C et du temps t pendant lequel le sujet est exposé à cette concentration. Les effets varient bien évidemment selon que la personne est un enfant ou une personne âgée, ainsi qu'en fonction de son état de santé ou de ses facultés d'accoutumance.

Aussi les courbes dans un plan (C, t) correspondant à un effet donné sont établies pour une population représentative de l'ensemble des situations susceptibles de se produire.

Dans le plan $\text{Log}(C), \text{Log}(t)$, ces courbes sont assimilables à des droites et donc, à effet E constant, la concentration et le temps se trouvent pratiquement liés par une relation $C^n \cdot t = E$.

⁴ D'un point de vue réglementaire, la Circulaire du 10 mai 2010, récapitule les règles méthodologiques applicables aux études de dangers, à l'appréciation de la démarche de réduction du risque à la source et aux plans de prévention des risques technologiques (PPRT) dans les installations classées en application de la loi du 30 juillet 2003.

⁵ Les seuils de référence à retenir pour les installations classées sont donnés dans l'arrêté du 29/09/2005 paru au J.O. du 7/10/2005.

Sur ces courbes, les coordonnées d'un point (C, t) représentent :

- l'échelon de concentration C ;
- et le temps d'application t de cet échelon ;

nécessaires pour que l'effet E se produise.

En pratique lors d'un accident, un observateur n'est jamais soumis à un échelon de concentration constant dans le temps et il y a donc lieu d'intégrer les apports de chacun des pas de temps pendant lesquels la concentration est supposée constante en calculant (loi de Haber) la dose toxique :

$$I = \int C^n(t) \cdot dt$$

L'effet se produira si $I \geq E$.

Les valeurs des variables E et n dépendent à la fois du type d'effet considéré (apparition à faible probabilité de la létalité par exemple) et de la nature du produit toxique en cause. En première approximation, il est possible, de ne s'intéresser qu'à la distance maximale sous le vent de la source où une concentration donnée est atteinte. De manière plus sophistiquée, des approches de modélisations afin d'appréhender les fluctuations de concentrations dans un nuage toxique sont présentées au chapitre 1.

4 Mécanismes Physiques

Les phénomènes de dispersion atmosphérique d'un produit libéré accidentellement dépendent :

- des conditions météorologiques (champ de vent, de température, ...) et de l'écoulement atmosphérique, plus exactement, de la couche limite atmosphérique (CLA) ;
- de l'environnement (nature du sol, présence d'obstacles, topographie) et l'écoulement local lié à celui-ci ;
- des conditions de rejet (nature du produit, le mode d'émission, ...) ;
- des modes d'interaction entre ces mécanismes.

4.1 Conditions météorologiques et écoulement dans la CLA

4.1.1 Structure de l'atmosphère

Dans le cadre du risque accidentel, les phénomènes liés à la dispersion d'un produit se produisent principalement (à l'exception des fumées de d'incendie de grande dimension) dans la couche inférieure de l'atmosphère, dite couche limite atmosphérique (CLA), de quelques centaines de mètres d'épaisseur à tout au plus 1 à 2 km dans la plupart des cas. La couche limite est directement influencée par le rayonnement solaire et varie donc ainsi notablement au cours de la journée, comme l'illustre la Figure 1. Stull (1988) [43] définit la couche limite atmosphérique comme la partie de la troposphère directement influencée par la présence de la surface terrestre et qui répond aux forçages de la surface à des échelles de temps de l'ordre de l'heure. Elle se différencie avec la troposphère libre par de fortes variations de la température dans la CLA aux échelles du cycle diurne.

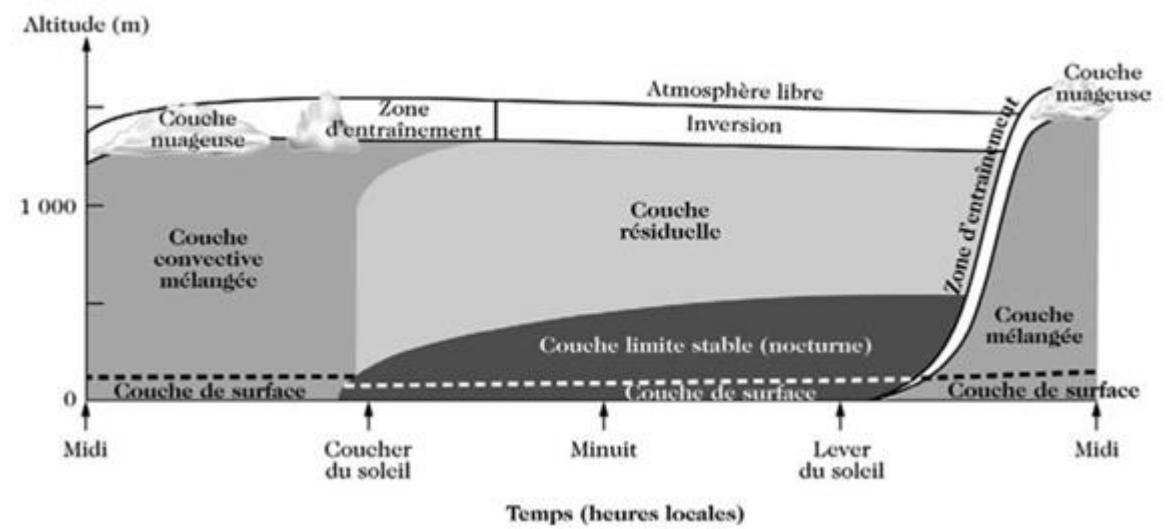


Figure 1 : Evolution schématique de la CLA au cours de la journée (d'après [43] cité par [44]). La couche limite dans les régions de hautes pressions consiste en 3 parties : une couche de mélange très mélangée, une couche résiduelle moins-turbulente et une couche stable

Dans la CLA, il importe donc de connaître, en particulier, la structure de l'écoulement du vent et du champ des températures qui vont être caractérisés par deux paramètres fondamentaux :

- le gradient vertical de vitesse ;
- le gradient vertical de température.

Ces gradients vont être influencés principalement par deux mécanismes physiques :

- d'une part, des effets de frottement de l'air sur le sol. Ces effets dépendent des conditions orographiques⁶ locales ;
- d'autre part, des échanges de chaleur entre le sol et l'atmosphère. Ces échanges vont varier avec le cycle diurne, les conditions météorologiques et la nature du sol.

Selon la localisation géographique, ces mécanismes vont être plus ou moins actifs et vont jouer sur l'épaisseur de la couche limite atmosphérique. Celle-ci va dépendre de la rugosité du sol mais aussi de la météorologie (ensoleillement, nébulosité...). Ainsi, la couche limite atmosphérique peut être décomposée en trois parties comme représenté sur la Figure 4 [17] :

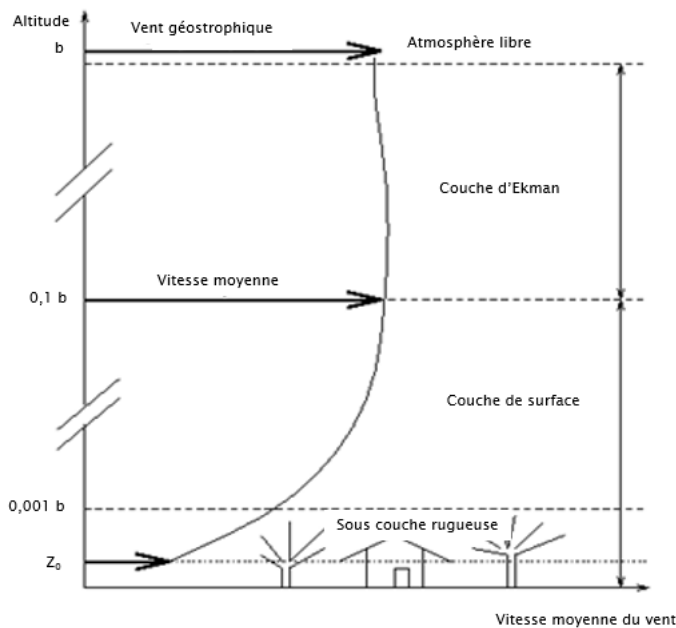


Figure 2 : Décomposition schématique de la couche limite atmosphérique (d'après [17])

- **Une couche de surface** (ou couche limite de surface, noté CLS) dont l'épaisseur est de l'ordre de quelques dixièmes de l'épaisseur de la couche limite atmosphérique, soit entre une centaine de mètres les jours de vent fort et quelques mètres les nuits claires et par vent faible (cf. illustration sur la Figure 1 et Figure 2). La force de cisaillement et les flux de chaleur y sont supposés quasiment constants en fonction de l'altitude. Le principal moteur du flux radiatif est le rayonnement solaire. La distribution verticale de température (stratification thermique de l'air) induit aussi des mouvements verticaux des masses d'air chauffées et refroidies à proximité du sol. Le vent résulte de l'équilibre entre les forces de pression⁷ et les forces de frottement (les effets de la force de Coriolis sont, dans cette zone, négligeables) et de la stratification thermique de l'air. Le profil vertical de la vitesse du vent est perturbé du fait du frottement de l'air sur le sol. La présence d'obstacles ou de discontinuités va modifier la trajectoire du vent. La couche de surface est donc une zone à fort gradient vertical de vitesse de vent. Pour les rejets accidentels au niveau du sol et des distances considérées lors d'une modélisation de dispersion accidentelle, la zone d'intérêt est majoritairement localisée dans cette couche de surface.

⁶ Relatif à l'agencement des reliefs terrestres.

⁷ Les forces de pression proviennent des inhomogénéités de pression dues à l'échauffement inégal de l'air. Elles sont perpendiculaires aux isobares et dirigées des hautes pressions vers les basses pressions.

- Au sein de la couche de surface, il est possible de distinguer dans la partie inférieure, **la sous-couche rugueuse**. L'épaisseur de cette zone varie de moins d'un mètre (en mer) à quelques dizaines de mètres (dans les zones fortement urbanisées). Du fait de la présence des éléments de rugosité dans cette zone, l'écoulement de l'air est fortement turbulent, non homogène et instationnaire. Les conditions aux limites des propriétés moyennes de l'écoulement dans cette zone sont décrites en partie par le paramètre appelé longueur de rugosité (cf. chapitre 4.2.1).
- **Une couche d'Ekman ou couche dite de transition** surmontant la couche limite de surface et s'étendant jusqu'à la limite supérieure de la couche limite atmosphérique. La force de cisaillement et le flux de chaleur y décroissent avec l'altitude et deviennent négligeables au sommet de la couche. Le champ de vent résulte de l'équilibre entre les forces de pression⁸, les forces de frottement et la force de Coriolis⁹ ainsi que de la stratification thermique de l'air. Cette dernière provoque une rotation de la direction du vent à travers la couche (spirale d'Ekman) vers la direction du vent géostrophique propre à l'atmosphère libre. Sous l'effet de la rotation de la Terre, la direction dans la couche d'Ekman n'est ainsi pas colinéaire à celle du vent dans la CLS.

Plus haut en altitude, dans l'atmosphère libre, les forces de frottement n'ont plus d'effet, le vent résulte uniquement de l'équilibre entre les forces de pression et la force de Coriolis. Le vent dit géostrophique, est uniforme, horizontal et très peu turbulent.

4.1.2 Echelle des mouvements atmosphériques

La vitesse du vent joue deux rôles dans le processus de dilution : l'un dans le transport du produit, appelé aussi advection, l'autre dans sa diffusion due à la turbulence qu'il génère.

La vitesse instantanée du vent reflète la nature turbulente du vent. Elle se décompose en une partie moyenne et une partie fluctuante (ou turbulente) :

- la vitesse moyenne est une quantité qui traduit la « force » du vent en un point de l'espace sur des périodes de temps assez longues (10 minutes par exemple) pour que le résultat ne soit sensible ni aux fluctuations lentes, ni aux variations rapides du vent ;
- la partie qui représente les fluctuations turbulentes de la vitesse autour de sa moyenne. Ces fluctuations sont décrites statistiquement (écarts types, densités spectrales, par exemple).

Le vent est un écoulement turbulent d'air, constitué d'une multitude de tourbillons de tailles diverses, imbriqués les uns dans les autres, les petits étant transportés par les plus gros, eux-mêmes transportés par le mouvement d'ensemble.

L'écoulement de l'air atmosphérique est donc constitué d'une large gamme d'écoulements interdépendants caractérisés par des tailles allant du millimètre au millier de kilomètres [18].

Un tableau exhaustif des échelles atmosphériques est donné en Annexe 1.

Chaque phénomène atmosphérique est identifié par son extension horizontale et par sa durée de vie, ces deux paramètres sont fortement corrélés. De ce fait, la vitesse du vent en un point donné de l'espace, présente de fortes variations plus ou moins irrégulières en termes d'amplitudes et de fréquences différentes.

⁸ Les forces de pression proviennent des inhomogénéités de pression dues à l'échauffement inégal de l'air. Elles sont perpendiculaires aux isobares et dirigées des hautes pressions vers les basses pressions.

⁹ La force de Coriolis est perpendiculaire à la vitesse du vent, orientée vers sa droite dans l'hémisphère Nord, du fait de la rotation de la terre.

Les mouvements à grandes échelles ou échelles synoptiques ont une taille supérieure à la centaine de kilomètres. Les différentes périodes temporelles de ces mouvements sont de l'ordre :

- de l'année et celles-ci s'expliquent par des variations saisonnières ;
- de 4 jours du fait des variations associées aux perturbations qui traversent une région donnée ;
- de 24 heures, étant donné les variations journalières, et les phénomènes thermiques jour-nuit.

Les mouvements à petites échelles ont une taille inférieure au kilomètre et ont une durée de vie de quelques minutes au maximum (micro-échelles). Ils sont liés à la turbulence et sont générés, dans la couche limite atmosphérique, par la présence d'obstacles ou par la rugosité des sols.

A cette échelle, l'écoulement d'air turbulent est constitué d'une multitude de tourbillons de tailles différentes, emportés par le mouvement d'ensemble¹⁰.

Des mouvements de tailles intermédiaires (mésos-échelles) assurent la transition entre les précédents. Entre les petites et les méso-échelles, on distingue parfois des échelles dites sub-meso (cf. Annexe 1).

Le Tableau 1 donne une correspondance approximative entre la taille moyenne des mouvements atmosphériques et les périodes qui leur sont associées.

Taille [km]	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻¹	1	10	10 ²	10 ³	10 ⁴
Période	1 s	10 s	1 min	10 min	2 h	15 h	7 j	10 j
Echelles	Micro-échelles			Mésos-échelles		Grandes échelles		

Tableau 1 : Echelles des mouvements atmosphériques (Atkinson, [23])

Parallèlement, une analyse spectrale permet de retrouver l'échelle des fluctuations de l'écoulement de l'air (cf. Figure 3) [20].

¹⁰ Hunt (1992) [19] précise qu'il existe des « vortical eddies » qui sont des zones à fort rotationnel transportées de façon aléatoire dans l'écoulement, et des « structural eddies », qui sont des tourbillons plus localisés liés aux propriétés particulières de l'écoulement.

En anglais, le vocable « eddies » désigne les structures tourbillonnaires liées aux écoulements turbulents, tandis qu'un autre vocable, « vortex », désigne de façon plus générale tous les mouvements de rotation de fluides autour d'un axe central. Cette distinction n'a pas d'équivalent en français ou, dans les deux cas, le vocable « tourbillon » est utilisé.

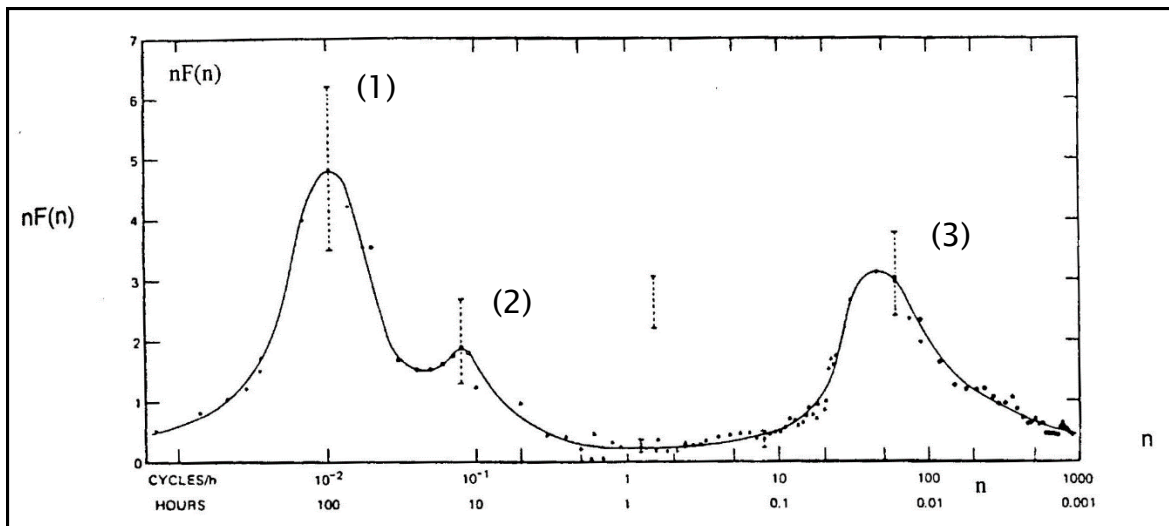


Figure 3 : Spectre énergétique de la vitesse du vent selon Van der Hoven [20]

Les pics du spectre montrent dans quelle mesure les tourbillons participent effectivement à l'énergie turbulente. On retrouve les tendances explicitées précédemment avec :

- 1) le pic relatif à une période d'environ 100 heures traduisant les variations de vitesse du vent associées aux passages successifs de cyclones et d'anticyclones ;
- 2) le pic relatif à une période d'environ 12 heures traduisant l'augmentation de la vitesse du vent dans la journée et sa diminution durant la nuit ;
- 3) le pic relatif à une période comprise entre 10 s et 10 min traduisant la turbulence de petite échelle.

Pour l'étude de la dispersion accidentelle de produits, dans la couche limite atmosphérique, les informations concernant la structure des mouvements **de petites échelles (micro-échelles)** sont les plus pertinentes. A cette échelle, la forme du spectre dépend fortement de la stratification thermique de l'atmosphère.

4.1.3 Structure de la turbulence atmosphérique à petite échelle

La turbulence atmosphérique à **petite échelle** a deux origines distinctes :

- la première d'origine « thermique », due à la distribution de température dans l'atmosphère ;
- la seconde d'origine « mécanique » générée par le cisaillement du vent en contact avec le sol.

Les conditions météorologiques ne vont jouer que sur l'aspect thermique de la turbulence en influençant le gradient vertical de température.

4.1.3.1 Turbulence d'origine thermique

Le mécanisme sous-jacent à la turbulence d'origine thermique est le suivant. Un volume d'air élémentaire déplacé adiabatiquement¹¹ vers le haut se détend du fait de la baisse de pression et par conséquent se refroidit.

L'air sec se refroidit de 0,98°C pour une élévation de 100 m (gradient de l'adiabatique sèche). L'air saturé en eau se refroidit de 0,55°C pour une élévation de 100 m (gradient de l'adiabatique saturée). Ces profils adiabatiques sont appelés aussi « gradients neutres ».

¹¹ Sans échanges de chaleur avec l'extérieur.

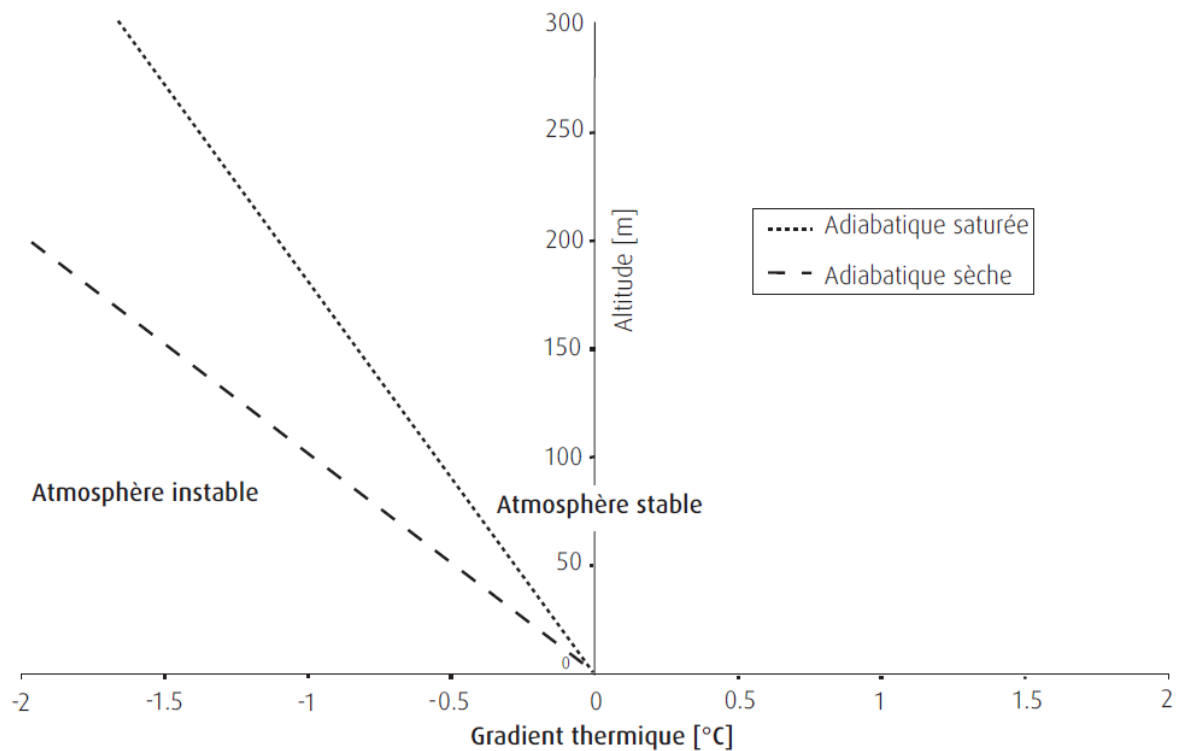


Figure 4 : Comparaison entre le gradient de température de l'atmosphère et le gradient thermique de l'adiabatique

En effet, si le gradient thermique est identique à celui de l'adiabatique, les échanges thermiques entre le sol et l'atmosphère sont inexistantes et une parcelle d'air reste à une hauteur où elle a été amenée adiabatiquement.

L'évolution de la température de l'atmosphère avec l'altitude peut s'écarter de ces conditions (comme le montre la Figure 4) .

Si le gradient de température de l'atmosphère est inférieur au gradient thermique de l'adiabatique alors tout volume d'air déplacé vers le haut a, avant équilibre thermique, une température plus élevée que l'air qui l'entoure. La masse volumique du volume élémentaire est plus petite que l'air qui l'entoure et continue de ce fait de se déplacer vers le haut. L'atmosphère favorise alors les déplacements de gaz et peut être qualifiée d'**instable**. Ce phénomène est illustré sur la Figure 5a par le cas d'une particule en équilibre à un niveau initial n1. Si celle-ci est déplacée verticalement jusqu'au niveau n2 elle tend à s'éloigner davantage de n1.

Si le gradient de température de l'atmosphère est supérieur au gradient thermique de l'adiabatique alors tout volume d'air déplacé vers le haut a, avant équilibre thermique, une température plus petite que l'air qui l'entoure. La masse volumique du volume élémentaire est plus importante que l'air qui l'entoure et tend à se déplacer vers le bas à sa position initiale (Figure 5 b). L'atmosphère ne favorise alors pas les déplacements de gaz et peut être qualifiée de **stable**.

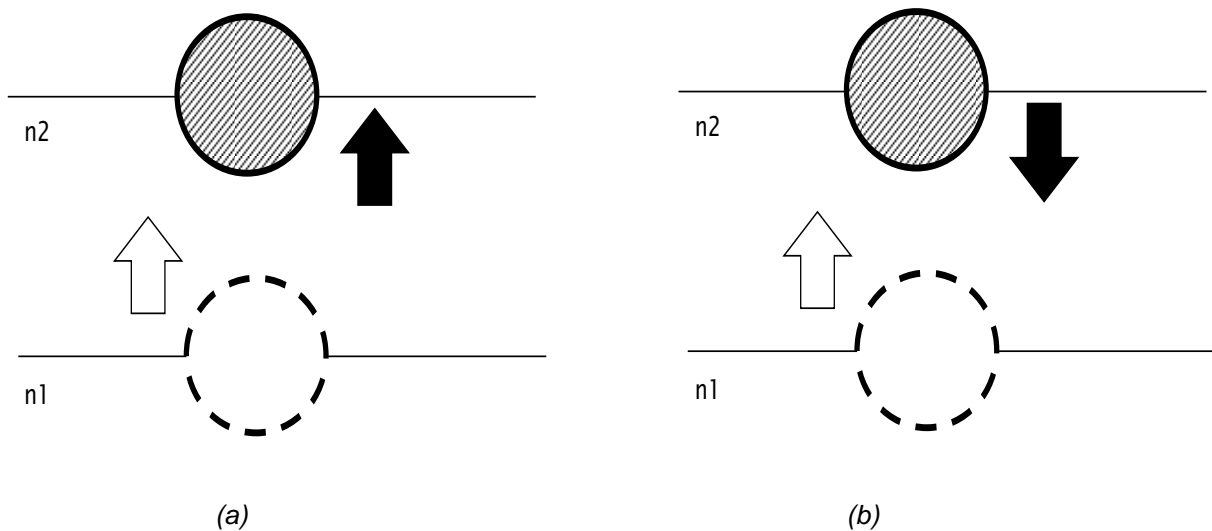


Figure 5 : Illustration de l'instabilité (a) et de la stabilité (b) et atmosphérique

Des phénomènes d'inversion de température peuvent aussi survenir se traduisant par une augmentation de la température avec l'altitude puis une baisse.

4.1.3.2 Turbulence d'origine mécanique

Les irrégularités de surface telles que les arbres, les bâtiments, les irrégularités topographiques conditionnent notablement l'écoulement du vent au voisinage du sol. Dans ces conditions, la turbulence produite est essentiellement d'origine mécanique. Ces irrégularités de surface sont caractérisées par une rugosité moyenne du terrain, noté z_0 , qui traduit de manière macroscopique l'influence de la surface sur le profil de vitesse. Elle correspond à la hauteur moyenne pour laquelle la vitesse moyenne du vent est nulle.

4.1.3.3 Degré de stabilité de l'atmosphère

Nombre de Richardson [Richardson, 1920]

Comme indiqué précédemment, selon l'importance d'un type de turbulence par rapport à l'autre, l'atmosphère peut être stable, neutre ou instable. Le degré de stabilité atmosphérique peut être caractérisé en comparant le gradient vertical de température potentielle¹² $\frac{\partial \theta}{\partial z}$ à celui lié à la vitesse du vent. Cette comparaison s'effectue généralement au moyen du nombre de Richardson de gradient qui s'exprime :

$$R_i = \frac{g}{\theta} \frac{\left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)}{\left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2}$$

avec :

- $R_i < 0$ traduisant une atmosphère instable ;
- $R_i = 0$, une atmosphère neutre ;
- $R_i > 0$, une atmosphère stable.

¹² La température potentielle, θ , correspond à la température prise par une particule d'air sec amenée adiabatiquement au niveau de pression de 1000 mbar.

Longueur de Monin-Obukhov [Monin-Obukhov, 1954]

La longueur de Monin-Obukhov permet aussi de qualifier l'importance relative de la turbulence mécanique et de la turbulence convective, à une altitude donnée. Elle est donnée par :

$$L = - \frac{U_*^3 \rho C_p T}{g k q}$$

avec :

- ρ : masse volumique de l'air [kg/m^3] ;
- U_* : vitesse de frottement [m/s]. Cette vitesse est égale à $\sqrt{\frac{\tau}{\rho}}$ avec τ , force de cisaillement de vent au sol ;
- C_p : chaleur massique de l'air à pression constante [J/kg.K] ;
- T : température de l'air [K] ;
- g : constante de gravité [9,81 m/s²] ;
- k : constante de Von Karman [0,4] ;
- q : flux moyen de chaleur dans la direction verticale [W/m].

Ainsi, lorsque :

- $q=0$, $L \rightarrow \infty$, le gradient vertical de température est adiabatique ;
- $q<0$, $L>0$, le gradient vertical de température est positif et l'atmosphère stable ;
- $q>0$, $L<0$, le gradient vertical de température est négatif et l'atmosphère instable.

La signification géométrique de cette longueur est la suivante :

- à des altitudes très petites devant L , la turbulence mécanique prédomine ;
- à des altitudes de l'ordre de L ou plus grandes, la turbulence convective prédomine.

Le rapport $\frac{z}{L}$ indique l'importance relative de la turbulence mécanique et de la turbulence convective à l'altitude z .

Classification de Pasquill

Une classification de la stabilité atmosphérique peut être effectuée au travers des classes de Pasquill [Pasquill, 1974] qui varient de A à F, de l'atmosphère la plus instable à la plus stable.

Les classes de stabilité peuvent être associées à des conditions météorologiques données (voir le Tableau 2).

Vitesse du vent à 10 m	JOUR			NUIT	
	Rayonnement solaire incident			Nébulosité	
[m/s]	Fort	Modéré	Faible	Entre 4/8 et 7/8	<3/8
<2	A	A-B	B	-	-
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Tableau 2 : Classes de stabilité de Pasquill [45]

Il est aussi possible de relier la rugosité moyenne du terrain z_0 , et la longueur L aux classes de stabilité de Pasquill, (voir la Figure 6) [47].

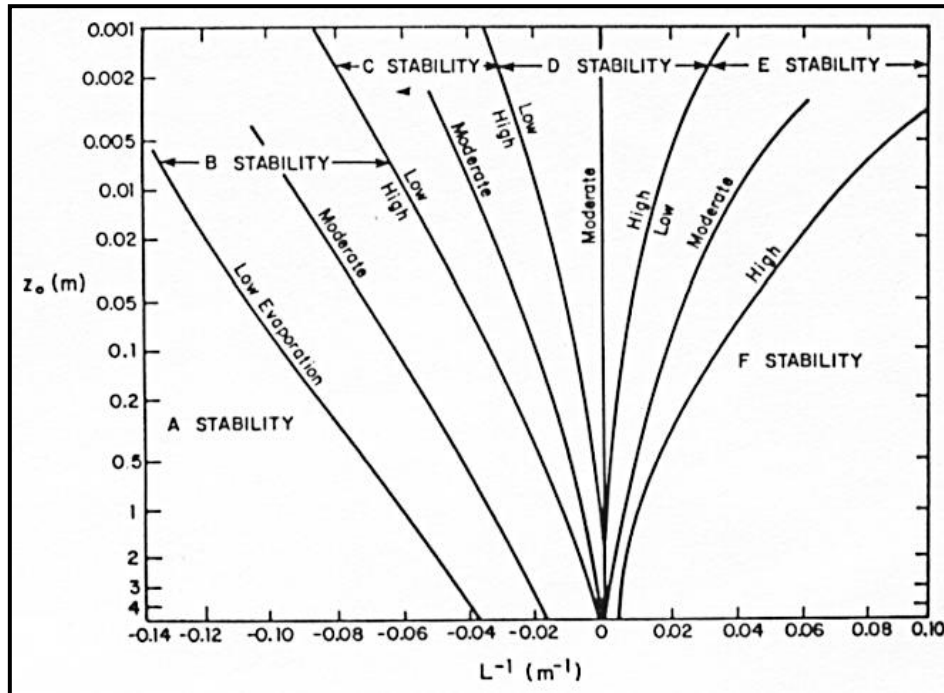


Figure 6 : Relation entre la longueur de Monin-Obukhov L et la rugosité z_0 pour différentes classes de stabilité de Pasquill (issu de [47])

Une autre discrétisation de la caractérisation de la stabilité est possible à travers la classification de Doury qui définit deux classes de stabilité :

- les conditions de diffusion normale (DN). Cette situation est celle existant le jour, ou la nuit avec des vitesses de vent supérieures à 3 m/s ;
- les conditions de diffusion faible (DF). Cette situation est celle existant la nuit avec des vitesses de vent inférieures à 3 m/s.

4.1.4 Stabilité atmosphérique et conditions météorologiques

4.1.4.1 Mécanismes généraux

Il est intéressant d'examiner les phénomènes météorologiques qui peuvent amener l'atmosphère à s'éloigner des conditions d'adiabatiques.

Durant la journée, par temps clair, la répartition verticale des températures est proche de l'adiabatique ou supérieure en raison du fort réchauffement du sol par le soleil. Après le coucher du soleil, le sol se refroidit rapidement et refroidit par rayonnement les très basses couches de l'atmosphère. Par vents faibles, le refroidissement peut gagner un niveau de plus en plus élevé mais toutefois limité à quelques centaines de mètres au-dessus du sol, ce qui détermine une stabilité considérable des basses couches de l'atmosphère. Deux heures après l'aube environ, la chaleur du soleil brise l'inversion.

La capacité qu'a le sol de perdre ou d'emmagasiner de la chaleur par rayonnement peut donc agir de façon très nette sur la répartition verticale des températures. Or, les propriétés de rayonnement du sol peuvent varier dans de larges limites suivant sa nature et sa couverture végétale. Les sols nus absorbent et perdent la chaleur rapidement. En revanche, les gains et pertes de chaleur se font de façon modérée pour les sols où la végétation est dense et humide. Un sol couvert de neige par exemple

est plus favorable à la formation et à la persistance d'inversions thermiques qu'une région verdoyante ou boisée.

La couverture nuageuse peut également contribuer à la stabilité des basses couches de l'atmosphère en interceptant le rayonnement solaire direct et diffus et en émettant son rayonnement propre de grandes longueurs d'ondes. En particulier, dans le cas d'une couche nuageuse continue et basse, le rayonnement de celle-ci peut neutraliser les effets de la turbulence dus au rayonnement du sol. La Figure 7 illustre les mécanismes d'absorption des rayonnements solaires dans la couche limite atmosphérique.

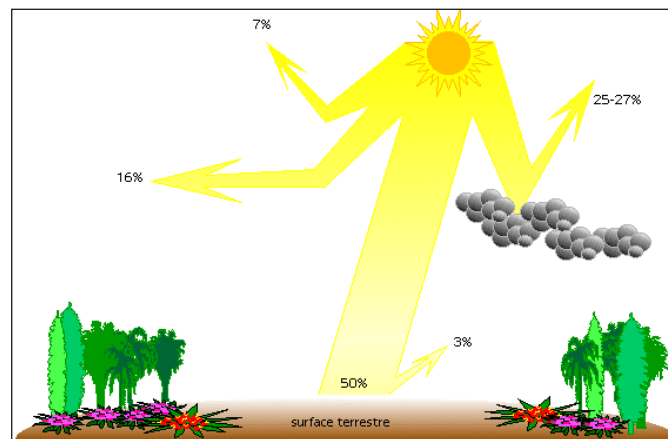


Figure 7 : Absorption du rayonnement solaire dans la couche limite atmosphérique

4.1.4.2 Conditions de stabilité neutre

Par vent fort ou par vent modéré et ciel couvert :

- des transferts importants de quantité de mouvement ont lieu dans la couche limite atmosphérique ;
- le gradient vertical de température $\frac{\partial T}{\partial z}$ tend vers le gradient de température adiabatique ;
- le nombre de Richardson est nul. La stabilité atmosphérique est qualifiée de « neutre ».

Pour des vents faibles, la turbulence d'origine thermique prédomine et va influencer de façon sensible la stabilité atmosphérique.

4.1.4.3 Conditions de stabilité instable

Au cours d'une journée ensoleillée, avec des vents faibles, le sol s'échauffe par rayonnement beaucoup plus rapidement que l'air. Le gradient de température vertical négatif est inférieur au gradient de température adiabatique. Le nombre de Richardson est alors négatif. Des tourbillons convectifs apparaissent introduisant une instabilité qui a tendance à amplifier les mouvements verticaux. La stabilité atmosphérique est qualifiée « d'instable ».

4.1.4.4 Conditions d'inversion de température

En fin de journée, à mesure que le soleil se couche, le sol se refroidit plus rapidement que les couches d'air adjacentes. A proximité du sol, le gradient de température vertical est supérieur au gradient de température adiabatique. Par contre, plus en altitude, les couches d'air sont plus froides à mesure que l'on s'élève (gradient de température vertical négatif inférieur au gradient de température adiabatique) du fait des conditions rencontrées au cours de la journée. **L'atmosphère est donc stable près du sol et instable plus haut en altitude.**

En début de journée, à mesure que le soleil se lève, le sol se réchauffe davantage et plus rapidement que les couches d'air adjacentes. A proximité du sol, le gradient de température vertical est inférieur au gradient de température adiabatique. En revanche, plus en altitude, les couches d'air sont plus chaudes à mesure que l'on s'élève (gradient de température vertical négatif supérieur au gradient de température adiabatique) du fait des conditions rencontrées au cours de la nuit. **L'atmosphère est donc instable près du sol et stable plus haut en altitude.**

Ces deux dernières situations sont qualifiées « **d'inversion de température** ».

4.2 Environnement

La dispersion atmosphérique d'un produit est influencée par l'occupation du sol, à la fois dans le champ proche avec la présence d'obstacles isolés (bâtiments industriels, lotissements, ...), mais aussi dans le champ lointain avec l'existence d'accidents topographiques (vallées, falaises, collines, buttes, ...). Ces éléments perturbent le champ de vent de façon mécanique. Par ailleurs, les éventuelles discontinuités de recouvrement du sol vont être à l'origine d'effets thermiques propres à modifier le champ de vent avec la formation de mécanismes de brises, telles les brises de mer.

4.2.1 Effets mécaniques

Les obstacles et les accidents topographiques perturbent la trajectoire du vent et modifient les caractéristiques moyennes et turbulentes de l'écoulement de l'air. Ces modifications sont, naturellement, fonction de la taille et de la forme des obstacles topographiques rencontrés par le vent.

Dans le tableau ci-après, des valeurs de longueur de rugosité sont données pour quelques types caractéristiques de surface sur des sites homogènes de grandes extensions horizontales. La longueur de rugosité représente la hauteur moyenne à laquelle le vent moyen est considéré. Ce paramètre est fonction de la taille, de la forme et de la densité des obstacles qui recouvrent le sol.

Sites Caractéristiques	Longueur de rugosité z_0 (m)
Grandes étendues d'eau (mer, océan, lac)	de 0,001 à 0,01
Rases campagnes, aéroports	de 0,01 à 0,10
Zone faiblement urbanisées, bocages	de 0,01 à 0,5
Zone urbanisées, industrielles ou forestières	de 0,5 à 1,5
Centres des villes	de 1,5 à 2,5

Tableau 3: Classes de rugosité (d'après Wieringa, [48])

A titre d'illustration, il est intéressant d'analyser la perturbation induite par ces éléments sur le champ de vent au travers de trois cas généraux avec :

- un site présentant un changement de rugosité ;
- un site avec une topographie accentuée ;
- un site avec un obstacle.

4.2.2 Changement de rugosité

Si la nature du sol présente une discontinuité et que la hauteur de rugosité passe brusquement de la valeur z_{01} à z_{02} , tel un écoulement de vent provenant d'un habitat dispersé vers un habitat plus dense (soit $z_{02} > z_{01}$), alors la structure du vent se trouve profondément perturbée en aval du changement de rugosité (voir la Figure 8) [17].

La perturbation engendrée est fonction de l'importance relative des longueurs z_{01} et z_{02} , avant et après la discontinuité.

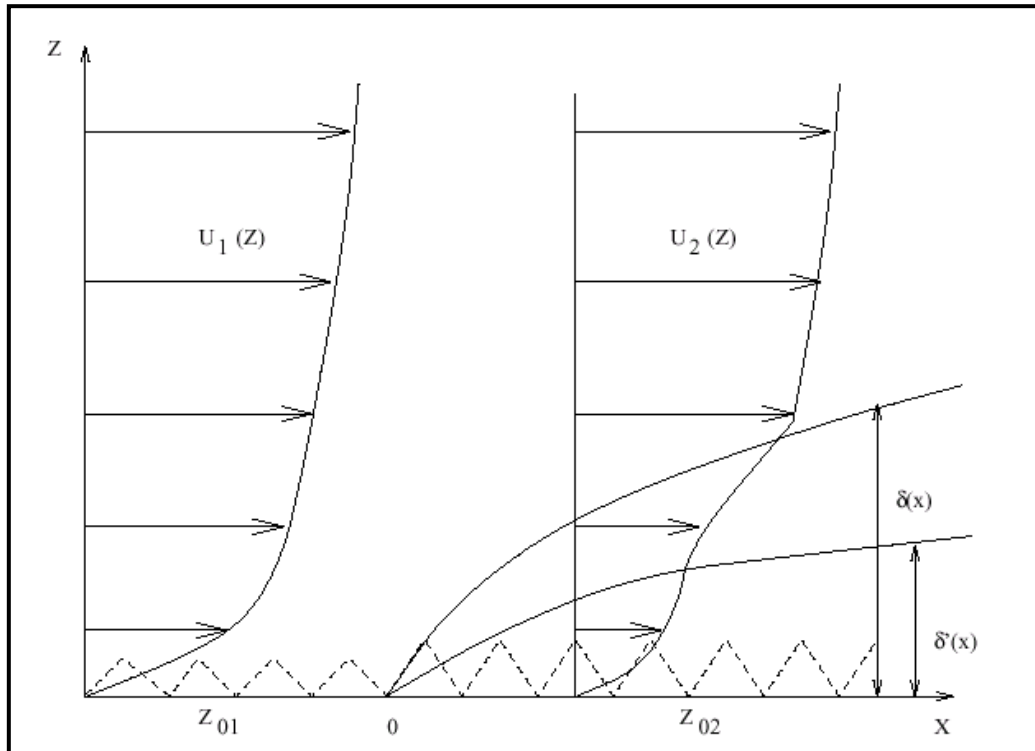


Figure 8 : Ecoulement sur une surface à rugosité variable d'après [17]

Ainsi, à l'aval immédiat de la discontinuité, on va distinguer (voir la Figure 8) :

- une zone située loin de la surface, dans laquelle les propriétés du vent sont toujours reliées aux paramètres caractéristiques de la surface amont u_1 et z_1 ;
- une zone d'épaisseur δ , appelée couche limite interne, dans laquelle le profil des vitesses est affecté par la discontinuité.

Cette couche limite interne est constituée :

- d'une zone d'épaisseur δ' située près du sol, appelée sous-couche interne, dans laquelle l'écoulement est en équilibre vis à vis des nouvelles conditions aux limites ;
- d'une zone de transition dans laquelle les vitesses passent du profil amont (loin du sol) au profil de la sous-couche interne (près du sol).

δ , δ' sont des fonctions croissantes.

Enfin, loin en aval de la discontinuité, l'écoulement retrouve un équilibre et les vitesses s'alignent sur les caractéristiques de la surface en aval dépendant de u_2 et z_2 .

4.2.3 Topographie accentuée

Un écoulement qui aborde transversalement une colline subit une ascendance le long du versant au vent puis une descente le long du versant sous le vent. Au niveau du sommet, une zone de dépression et de survitesse se forme, tandis qu'au pied du versant au vent, l'air est ralenti (voir la Figure 9) [17].

Le rapport entre la vitesse moyenne incidente et la perturbation de vitesse au sommet est appelé "rapport fractionnaire de survitesse". Ce paramètre est proportionnel à la pente moyenne de l'obstacle.

Quand la pente est faible, on distingue :

- une couche interne, dans laquelle les perturbations sont principalement liées aux transferts turbulents ;
- une couche externe, dans laquelle ils sont négligeables ;
- et une zone de sillage, située en aval de la topographie, dans laquelle la turbulence est importante.

Si la pente ou la rugosité augmente fortement, une zone de recirculation se forme au pied du versant au vent et modifie les valeurs des survitesses. Pour certaines valeurs critiques du rapport, l'écoulement décolle immédiatement après le sommet puis se recolle en aval. La structure de l'écoulement dans la poche de décollement est très complexe et influence l'ensemble des caractéristiques du vent.

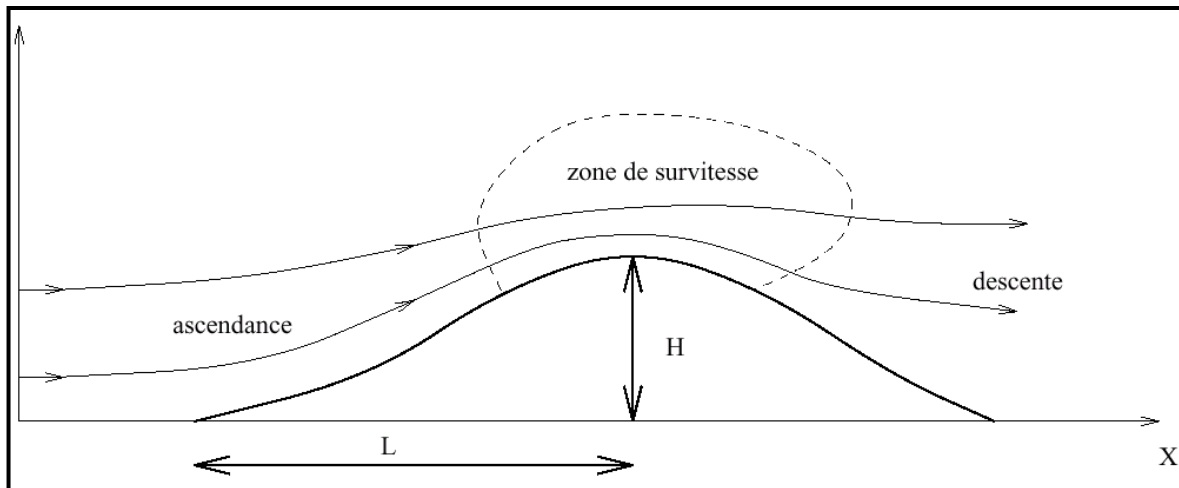


Figure 9 : Ecoulement au-dessus d'une colline selon Turbelin [17]

4.2.4 Obstacle

La perturbation du champ de vent par la présence d'obstacles isolés (constructions, haies...) va dépendre :

- de la géométrie et des dimensions de l'obstacle ;
- de son état de surface ;
- des caractéristiques du vent incident ;
- de l'environnement proche.

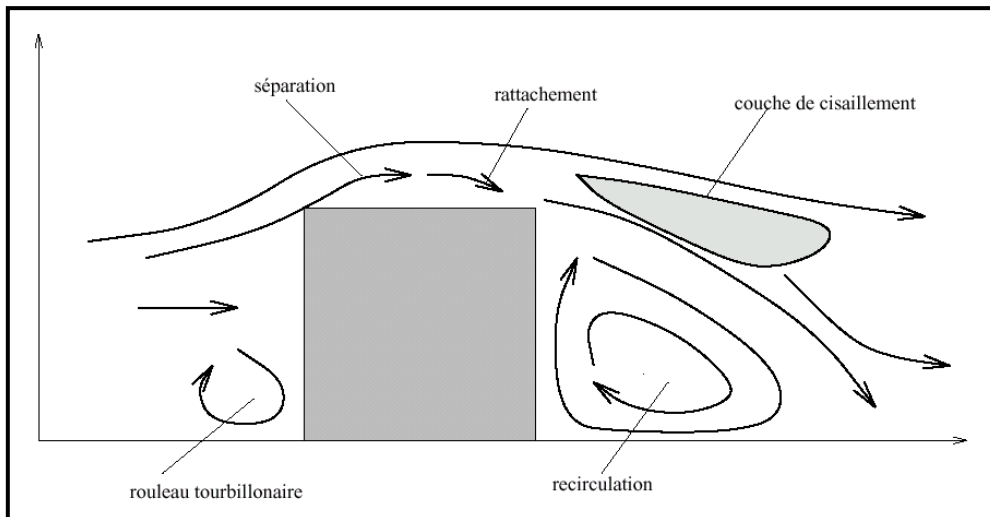


Figure 10 : Écoulement en présence d'un obstacle isolé selon Turbelin [17]

La complexité des écoulements autour d'obstacles isolés peut être illustrée par l'écoulement autour d'un bâtiment de forme cubique (voir la Figure 10 et la Figure 11) [17] :

- au niveau des parois de l'obstacle, se forment des couches limites qui se séparent et se rattachent, créant des zones de recirculation ;
- au niveau de la rencontre de l'écoulement décollé et du sillage, se forme une couche fortement cisillée ;
- au niveau de la face au vent, se forme un écoulement descendant qui, à la rencontre du sol, forme un rouleau tourbillonnaire. Ce rouleau se déplace en aval en contournant latéralement l'obstacle, formant des tourbillons dit en "fer à cheval".

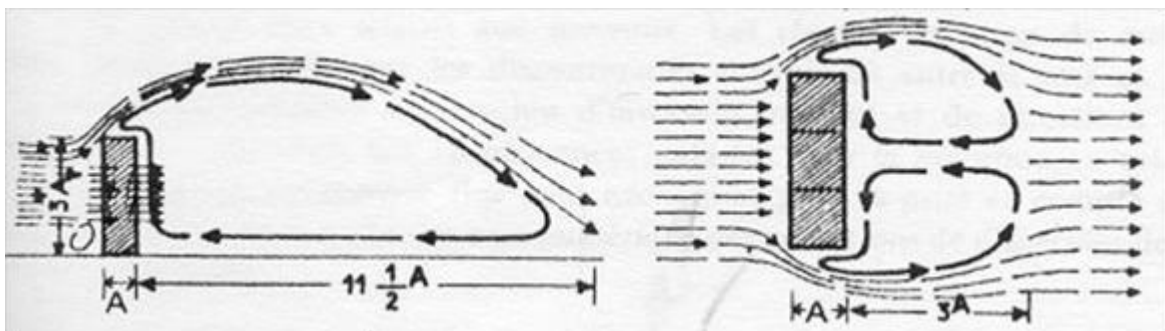


Figure 11 : Influence d'un obstacle sur l'écoulement du vent selon Hug [25] ci-dessous

4.2.5 Effets thermiques

Les effets thermiques tels des effets locaux de brise peuvent survenir dans des environnements montagneux ou à proximité d'étendue d'eau. En effet un gradient de pression horizontal peut résulter des réchauffements et des refroidissements différenciés des diverses surfaces (terre, eau, prairie, forêt, immeubles...). Ces contrastes thermiques dépendent de la nature des surfaces et/ou de l'exposition des reliefs au soleil. Les littoraux, les campagnes, les montagnes et même les villes peuvent être à l'origine de ces courants thermiques dont les deux plus importants sont les brises de terre et de mer (ou de lac), dites « brises littorales », et les brises de vallée et de montagne, dites « brises orographiques ».

4.3 Conditions de rejet et écoulement aux abords de l'émission accidentelle

Il existe une multitude de modes d'émission accidentelles sur un site industriel qu'il est impossible de citer et de décrire en intégralité dans ce rapport. Ce chapitre présente, des mécanismes et des modes d'émissions fondamentaux dont certains peuvent conditionner la dispersion atmosphérique des substances même dans des zones jugées éloignées des zones d'émission.

4.3.1 Etat physique initial du produit toxique/inflammable

Le stockage industriel des substances (matières premières, produits finis,) s'effectue dans des citernes, des sphères, des bouteilles, des containers, des fûts... Les substances peuvent être stockées sous la forme physique :

- d'un gaz (sous pression ou non) ;
- d'un liquide (réfrigéré ou non) ;
- d'un gaz liquéfié (la pression au sein du contenant est supérieure à la pression atmosphérique).

Pour les deux derniers cas, une libération accidentelle de ces produits va donner lieu à une émission diphasique pouvant conduire à la formation d'une nappe au sol et à la dispersion d'un nuage plus lourd que l'air. En effet la densité du nuage diphasique peut être élevée du fait à la fois de l'abaissement de température qui accompagne la décompression du produit sous pression et de la contribution des gouttelettes.

Le lecteur peut se rapporter au document « Ω -19 » [12] pour la description exhaustive des mécanismes du terme source émissif.

4.3.2 Mode d'émission dans l'atmosphère libre

L'objectif de ce chapitre est d'apporter des éléments afin de distinguer les rejets instantanés des rejets continus.

a) Fuite instantanée

La ruine consiste en la rupture totale du confinement entraînant un relâchement immédiat et instantané de la totalité du contenu.

Les rejets de type instantané sont principalement caractérisés par la quantité émise à l'atmosphère et la pression de la capacité au moment de la rupture (éclatement). Cette dernière peut être différente de la pression de stockage dans certains cas (cf. rapport INERIS - OMEGA 15 [14]).

Lors d'un rejet instantané de gaz suite à la ruine d'un réservoir par exemple, en l'absence d'obstacle de taille significative à proximité, il en résulte un volume gazeux semi-sphérique si l'émission a lieu au niveau du sol (cf. Figure 12) voire sphérique si l'enveloppe présente une résistance homogène.

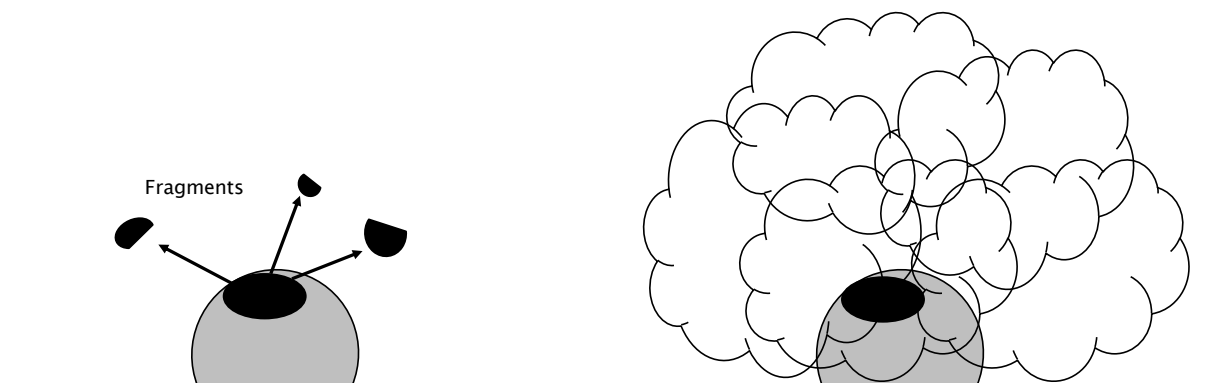


Figure 12 : Schéma de perte du confinement de réservoir, projections de fragments et développement d'un nuage

b- Fuite continue

La fuite continue se produit à partir d'une conduite ou d'une cuve de stockage ou d'une cheminée d'extraction ou d'une nappe formée suite à une ruine de réservoir. La fuite va principalement dépendre des conditions de stockage au moment de la fuite mais aussi de la taille, de la géométrie et de la hauteur de l'orifice de fuite, et dans le cas d'une nappe formée au sol des caractéristiques de celle-ci. A partir de ces données, il est possible d'estimer un terme-source (débit, vitesse, température du rejet, fraction liquide, évaporation de la nappe). Pour un rejet gazeux à partir d'un réservoir, le débit varie généralement dans le temps puisque durant la vidange du réservoir, la quantité de produit stocké diminuant, la pression de fuite s'atténue dans le temps.

Dans le cas de rejet massif à forte quantité de mouvement, le nuage est dans la plupart des cas de forme allongée (voir la Figure 13) dès lors que le vent est colinéaire.



Figure 13 : Photographie d'un rejet continu d'ammoniac [15] (Crédit Ineris)

c- Caractérisation du type de fuite

Plusieurs critères permettent de différencier les fuites instantanées des fuites continues du point de vue de la modélisation. Hanna [38] propose de comparer la durée d'émission de la fuite à la durée de transfert. La durée de transfert est définie comme la durée moyenne nécessaire au produit pour migrer de la source d'émission vers le point considéré. Cette durée de transfert, notée t , peut être estimée par le rapport :

$$t = \frac{x}{u}$$

avec :

- x : distance entre la source et le point considéré ;
- u : vitesse du nuage.

Si la durée de fuite est quatre fois supérieure au temps de transfert au point d'observation, la fuite est à considérer comme continue [16]. D'autres modèles retiennent comme critère le ratio entre la largeur et la longueur du nuage. Si ce ratio est plus grand qu'une valeur limite, la fuite est qualifiée d'instantanée [39].

4.3.3 Réactivité chimique dans l'atmosphère

Certains produits rejetés dans l'atmosphère ambiante peuvent être instables au contact de celle-ci et subissent des altérations d'origine chimique ou des transformations. On peut citer quelques exemples :

- l'épandage accidentel de trioxyde de soufre conduisant à de l'acide sulfurique (en phase vapeur) par réaction avec la vapeur d'eau [40][41][42] ;

- le fluorure d'hydrogène anhydre (AHF) est gazeux au-dessus de 19,5°C à pression atmosphérique. Il tend à polymériser et donc à modifier sa densité puisque le HF, initialement plus léger que l'air (monomère à 20 g/mol), devient à 20°C près de 2,5 fois plus lourd que l'air (74 g/mol). Il est très réactif avec l'eau et donc avec l'humidité de l'air ;
- l'Hexafluorure d'Uranium (utilisé dans l'industrie nucléaire pour l'enrichissement d'Uranium) réagit également avec l'humidité de l'air ambiant. Il conduit à la formation de HF gazeux et de particules solides de fluorure d'uranyle (UO_2F_2).

Les réactions avec l'humidité de l'air sont exothermiques favorisant une baisse de la densité du nuage mais du fait d'une polymérisation du HF des effets antagonistes existent vis-à-vis de la densité du nuage. Ces produits réactifs sont soumis à des réactions/transformations modifiant ainsi à la fois la densité du nuage, sa température et la proportion d'aérosols (liquide)/gaz. Ces réactions méritent d'être considérées dans la modélisation.

Lorsque des produits réactifs primaires (typiquement le dioxyde de soufre SO_2 , les oxydes d'azote NO_x) sont émis, les transformations chimiques sont généralement négligées pour des périodes d'étude de l'ordre de quelques minutes, comme cela peut être le cas en risque accidentel¹³. Ces produits sont alors traités comme des produits inertes ou stables.

La réactivité chimique joue son rôle également dès lors que le produit gazeux ou bi-phasique est en contact avec des surfaces solides telles que des bâtiments ou sol. Il a été démontré par des essais expérimentaux sur des cas de rejets massifs ([16], [36]), la corrélation positive entre la quantité de Cl_2 déposée et la quantité de matière organique et/ou la quantité d'eau.

Les produits émis peuvent aussi se trouver sous forme de particules (poussières...). Dans ce cas, il convient de tenir compte de l'influence des effets de la pesanteur pour analyser les possibilités de dépôt éventuel. A cet égard, il est généralement admis que lorsque les particules ont un rayon moyen inférieur à 5 μm , elles se comportent comme un gaz. En revanche, les particules ayant un rayon supérieur à 5 μm sont soumises à la force gravitationnelle non négligeable [38]. La force gravitationnelle agit sur ces particules en même temps que les autres forces de transport et de dispersion et lorsqu'elle devient prépondérante la particule peut se déposer sur le sol.

4.3.4 Dépôt au sol

Le dépôt au sein du nuage (particules solides ou liquides, gaz) contribue à l'appauvrissement du nuage. Le dépôt au sol d'un polluant est une thématique importante des modélisateurs dans le domaine de la dispersion atmosphérique (cf. le sondage auprès des modélisateurs dans [161]). Du point de vue des rejets de type accidentels la problématique est d'autant plus aigüe car dans le cas de rejets massifs, tels les rejets de gaz liquéfiés, le dépôt au sol du nuage peut représenter une perte de masse au sein du nuage qui peut contribuer notablement à réduire les distances d'effets [162]. Même si ce phénomène est fortement suspecté il n'est pas toujours pris en considération dans les modèles dédiés aux scénarios accidentels [163] et lorsqu'il est pris en considération les études de sensibilité montrent leur fort impact sur les résultats [164].

Quelques éléments sur la formulation générale ([165],[167]) utilisée par la plupart des modèles sont données ci-dessous. Le lecteur peut se rapporter à [165] pour une description plus complète des formulations proposées pour le dépôt sec et humide. Il est couramment considéré que la vitesse de dépôt, V_d , dépend d'une part diffusive (V'_d), explicable par le fait que les particules ou les gaz sont soumises au mouvement, et d'une part liée aux effets de la gravité (vitesse terminale V_t), qui dépend de la taille et de la densité des particules. La vitesse diffusive V'_d est généralement représentée comme l'inverse d'une résistance, qui est elle-même la somme de trois termes :

¹³ Dans le domaine du risque chronique, les mécanismes de dispersion sont étudiés sur des périodes de temps plus grandes, il devient alors nécessaire de prendre en compte ces transformations chimiques. De la même façon, pour la formation des polluants secondaires comme l'ozone, il convient de faire appel à des modèles munis de modules chimiques

$$V'_d = 1/r \text{ avec } r = r_a + r_b + r_s$$

Équation 1 : vitesse diffusive (m/s) selon Wesely [167]

- r_a est la résistance aérodynamique qui détermine l'effet des mouvements turbulents de l'atmosphère sur la particule. Elle ne dépend que des paramètres atmosphériques.
- r_b est la résistance de « sous-couche » qui détermine les effets de gêne mécanique imputables à la rugosité du terrain. Elle dépend également des caractéristiques physiques du polluant.
- r_c est la résistance de surface qui détermine la faculté d'absorption du sol. Elle dépend de la couverture du sol et de la réactivité chimique de l'élément. Elle tend vers 0 pour les grosses particules mais elle est prépondérante dans le cas d'un gaz. Dans le cas du rejet massif de Cl_2 , jugé moyennement réactif tels que SO_2 , NO_2 Hearn et al. [36] présente la résistance de surface comme le facteur principal donc limitant. Jugée primordiale, des projets de recherche ([169],[170]) sont en cours à la date de la rédaction de ce présent rapport pour investiguer la réactivité du Cl_2 .

Les composantes de la formulation générale (Équation 1) reliées à l'écoulement sont déterminées en fonction du degré de sophistication des modèles de dispersion atmosphérique (cf. [168] pour une revue pour les modèles CFD¹⁴).

4.4 Interaction entre les mécanismes de rejets et de l'écoulement atmosphérique

4.4.1 Principaux phénomènes de dilution

Plusieurs mécanismes participent au déplacement et à la dilution du nuage avec une intensité différente et variable selon l'évolution des caractéristiques du nuage.

Pour des rejets de grande vitesse, la quantité de mouvement va être prédominante dans les premiers instants, puis va être réduite avec les effets d'entraînement de l'air et du frottement du sol.

Tout rejet est émis avec une certaine quantité de mouvement dépendant de ses conditions de stockage. Ainsi, plus la pression de stockage est grande, plus la quantité de mouvement du nuage est initialement importante.

Pour un rejet continu non dirigé directement vers le haut ou vers le bas, cette quantité de mouvement va transporter le nuage de gaz vers l'avant.

Pour un rejet instantané, cette quantité de mouvement est supposée être distribuée tout autour du centre du nuage. Elle participe donc à son expansion, mais ne contribue pas de ce fait au déplacement du nuage.

Si le nuage est plus lourd que l'air, l'effet des forces de gravité est l'effet le plus fort.

Si le nuage est plus lourd que l'air, il va s'effondrer sur le sol ce qui va générer de la turbulence, entraîner de l'air et changer sa section transversale circulaire en une ellipse tronquée. Le sol exerce alors une force de frottement sur les zones du nuage qui sont en contact, ce qui diminue la quantité de mouvement du nuage (cf. le chapitre **4.4.2.3**).

Si le nuage au sol a une densité suffisamment petite par rapport à celle de l'air alors le nuage peut décoller du sol.

Enfin, la quantité de mouvement va être perdue progressivement du fait de l'entraînement de l'air et de l'éventuel frottement du nuage avec le sol, et à mesure que la densité devient proche de celle de l'air, l'effet lié à la turbulence atmosphérique devient le plus important, entraînant en permanence de l'air dans le nuage. Le nuage est entraîné par le vent.

¹⁴ Computational Fluid Dynamics

Lorsque le nuage est en contact avec le sol, les effets de rugosité¹⁵ dus à la nature de la surface créent une zone de turbulence à l'interface d'origine mécanique. Lorsque les irrégularités au sol sont de faible taille par rapport à celle du nuage, les perturbations qu'elles engendrent, affectent de façon globale la dispersion du nuage. L'hypothèse d'un terrain idéalement plat et de rugosité uniforme est généralement bien adaptée à cette problématique.

Cela étant, lorsque des obstacles de la taille du nuage existent ou que le recouvrement du sol n'est pas uniforme ou que la topographie est accidentée, les mécanismes de dispersion sont plus complexes et réellement propres aux caractéristiques du site. En effet, les obstacles peuvent générer des perturbations (tourbillons, zones de recirculations, brise) beaucoup plus importantes que la turbulence de petite échelle. Cet aspect est décrit au chapitre 4.4.3.

Quand le nuage est en contact avec le sol ou atteint une couche d'inversion de température (cf. chapitre 4.1), la composante verticale de la quantité de mouvement est transformée en composante horizontale, ce qui se traduit par une augmentation de la largeur du nuage.

4.4.2 Dilution du nuage – Entraînement de l'air

Plusieurs sources de turbulence vont entraîner de l'air dans le nuage et le diluer.

4.4.2.1 *Quantité de mouvement initiale – Jet turbulent*

En fonction des conditions de stockage, le nuage peut avoir une quantité de mouvement importante au début du rejet. On parle alors de jet turbulent. Les caractéristiques du jet dépendent de la quantité de mouvement du gaz émis. La différence entre la quantité de mouvement du nuage et celle de l'air environnant provoque une turbulence importante, à l'origine d'un taux important d'entraînement d'air favorisant la dilution du rejet.

L'absence de prise en compte de ce phénomène peut conduire à une surestimation des valeurs de concentration dans l'atmosphère.

4.4.2.2 *Cisaillement du champ de vent*

Si le nuage monte ou descend, alors il cisaille le champ de vent horizontal. La différence entre la quantité de mouvement du nuage et de l'écoulement de l'air produit des tourbillons favorisant le mélange de l'air dans le nuage.

4.4.2.3 *Densité du rejet*

Rejet dense

Lorsque le gaz est plus dense que l'air, il est qualifié de « **gaz lourd** ». Ce type de rejet est rencontré lors des fuites :

- d'un produit rejeté à température ambiante de masse volumique plus importante que celle de l'air (propane, chlore, phosgène...) ;
- d'un produit plus léger que l'air à température ambiante, mais rejeté à une température assez faible pour que sa masse volumique soit supérieure à celle de l'air. Lors de sa dispersion, le nuage de gaz voit sa masse volumique diminuer du fait de sa dilution avec l'air ambiant et de son réchauffement ;
- d'un aérosol. La phase condensée provoque par sa seule présence une augmentation considérable de la masse volumique globale du mélange. En outre, le changement de phase intervenant lors de la dispersion avec l'évaporation des gouttelettes de liquide maintient le nuage à une température voisine de la température d'ébullition du produit. La densité du rejet

¹⁵ La notion de rugosité sous-entend que les éléments (végétation...) qui la définissent, sont beaucoup plus petits que la taille du nuage.

reste de ce fait supérieur à celle de l'air. A titre d'illustration, c'est le cas de rejets de gaz liquéfiés tels l'ammoniac, le chlore... ;

- de produits qui en réaction avec l'air vont engendrer par réactions chimiques de nouveaux produits qui augmentent plus ou moins localement la densité du nuage (exemple du monoxyde d'azote réagissant avec l'oxygène de l'air pour donner du dioxyde d'azote plus dense que l'air).

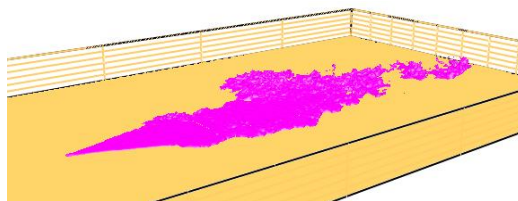
Lorsque la densité du gaz rejeté est plus grande que celle de l'atmosphère, les forces de gravité influencent de façon importante la dispersion du nuage.

A proximité du rejet, la force de gravité est à l'origine d'un mouvement d'ensemble vers le sol et l'expansion verticale du nuage est réduite. En contact avec le sol, le nuage se répand, poursuit son effondrement ce qui favorise son développement transversal.

La dilution du nuage s'opère sur la face supérieure du nuage et sur les faces latérales. Sur la face supérieure, les échanges sont assurés par les mouvements de turbulence de l'atmosphère et grâce à la turbulence induite par la différence de vitesse entre l'atmosphère et le nuage. Ce comportement est illustré par la Figure 14 ci-après avec la représentation d'une coupe d'isoconcentrations (à 500 ppm) relative à la modélisation d'un essai expérimental d'ammoniac avec le modèle FDS [30]. Enfin, il s'établit sur les faces latérales du nuage une recirculation interne favorisée par l'étalement du nuage au sol à mesure de son effondrement.



(a)



(b)

Figure 14 : Photographie (a) d'un nuage de gaz dense [15](Crédit INERIS) et iso concentration à 500 ppm (b) dans le nuage modélisé par CFD [30]

Gaz léger

Lorsque le gaz est moins dense que l'air, il est qualifié de « **gaz léger** ». Ce type de rejet concerne les fuites :

- d'un produit rejeté à température ambiante de masse volumique moins importante que celle de l'air (hydrogène...)
- d'un produit moins léger que l'air à température ambiante, mais rejeté à une température assez importante pour que sa masse volumique soit plus petite que celle de l'air (exemple des fumées d'incendie). Lors de sa dispersion, le nuage de gaz voit sa masse volumique augmenter du fait de sa dilution avec l'air ambiant et de son refroidissement.

Si la densité du gaz est suffisamment faible, l'effet des forces d'Archimède¹⁶ est susceptible de favoriser l'ascension du nuage de gaz.

Si la vitesse ascensionnelle est suffisante, le frottement des bords du nuage avec l'atmosphère lors de l'ascension peut favoriser la dilution (apparition de turbulence sur les bords du nuage). Enfin, le cœur du nuage plus léger que la périphérie peut s'élever plus rapidement avec pour conséquence un accroissement de la surface de contact entre l'atmosphère et le gaz.

Tous ces phénomènes sont susceptibles de favoriser la dilution du nuage [31].

L'influence des tourbillons atmosphériques sur les concentrations est évidemment un mécanisme primordial qui est abordé au moyen de concepts de modélisation présentée au chapitre 4.4.2.4

4.4.2.4 Quelques notions fondamentales sur l'influence des tourbillons turbulents de l'atmosphère sur un nuage

La dilution d'un nuage toxique est principalement due aux tourbillons turbulents car à l'échelle de l'écoulement atmosphérique la diffusion moléculaire est lente. Ainsi, un coefficient de diffusion moléculaire est de l'ordre $\sim 10^{-5}$ m²/s alors que des coefficients de diffusion turbulente en situation météorologique stable et instable sont équivalents à ~ 1 m²/s et ~ 100 m²/s respectivement.

4.4.2.4.1 Cas du rejet continu

La Figure 15 illustre l'influence du large spectre de tourbillons turbulents de la couche limite atmosphérique sur un panache. Sont représentés sur ce schéma, les effets des tourbillons turbulents, de taille caractéristique λ sur le panache, pour trois différents régimes suivant la taille relative de λ et de la largeur caractéristique du panache instantané caractérisé par σ_i . Trois régimes distincts sont définis selon le rapport σ_i/λ .

Pour résumer l'interprétation [32], il existe deux types de fluctuations en concentrations : les fluctuations internes au panache et les fluctuations de variations de la position du panache. Ces deux types de fluctuations sont déterminés par les tourbillons turbulents agissant de manières différentes sur le panache en fonction de la distance à la source.

Plus précisément, on voit qu'à proximité de la source, lorsque λ est important comparé à la mesure de la largeur instantanée du panache (que ce soit dans la direction horizontale ou verticale), l'effet de ces tourbillons est de déplacer le panache dans son ensemble. Il s'agit du battement du panache ou "meandering" qui génère l'effet d'intermittence. **Ces tourbillons sont responsables des ondulations du panache ce qui crée l'alternance sur les fluctuations mesurées à un point donné en produisant des périodes de concentrations nulles et non nulles.** Lorsque le panache s'est agrandi par diffusion turbulente jusqu'à atteindre la taille de λ , on a ensuite $\sigma_i \sim \lambda$. Les tourbillons de taille λ fragmentent le panache et entraînent à l'intérieur de celui-ci de larges poches d'air. Il y a rupture de la continuité du panache. Les tourbillons créent ainsi (ou maintiennent) la variance en concentration. Sans cet entraînement, la variance décroîtrait au fur et à mesure de l'accroissement de la teneur en air du mélange dans le panache.

A des distances plus importantes, lorsque la largeur du panache est beaucoup plus grande, soit $\sigma_i \gg \lambda$, ces tourbillons de taille λ tendent à mélanger le polluant à l'intérieur du panache et lissent les fluctuations de concentrations.

¹⁶ Les forces d'Archimède sont les forces de pression hydrostatiques qui s'exercent sur un corps placé dans un fluide et soumis au champ de pesanteur terrestre.

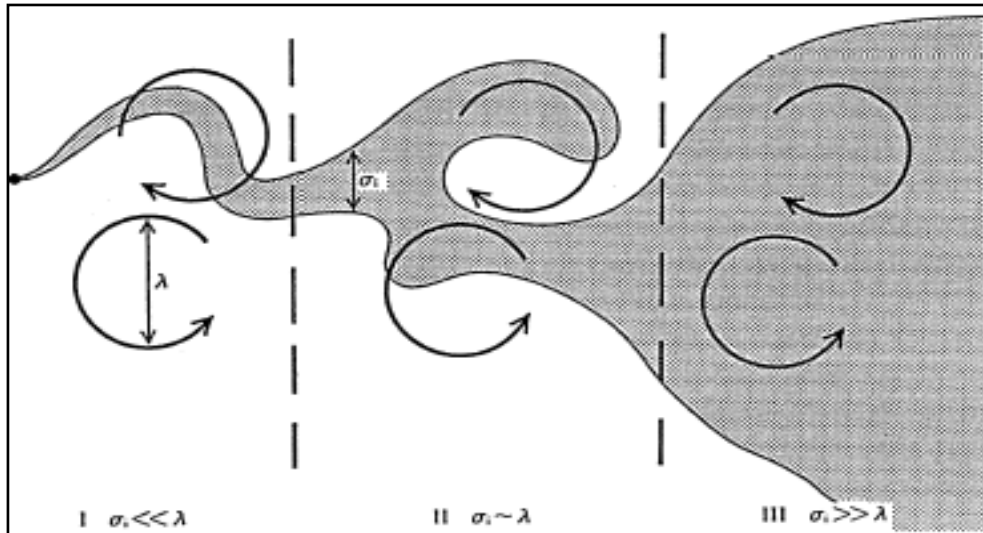


Figure 15 : Illustration de l'influence des tourbillons turbulents sur la dispersion d'un panache continu (issu des travaux expérimentaux de traçage de Mylne [32] ; réimprimé avec l'autorisation de *Boundary-Layer Meteorology* 60: 15-48, 1992 © et de Mylne K.R.)

4.4.2.4.2 Cas de la bouffée

Selon la dimension de la bouffée, les hautes et basses fréquences du spectre de turbulence seront ou non actives sur la dispersion de la bouffée. Ainsi, dans la direction horizontale, le processus de diffusion comprend deux phénomènes (cf. Figure 16) :

- la diffusion relative du produit autour du centre de masse de la bouffée (cas a) ;
- la diffusion des centres de masse des bouffées de produit (cas b).

Lorsque la bouffée est dans un champ turbulent de dimension comparable à celle de la bouffée, les deux processus sont actifs (cas c). Les cas a, b et c sont illustrés sur la Figure 16.

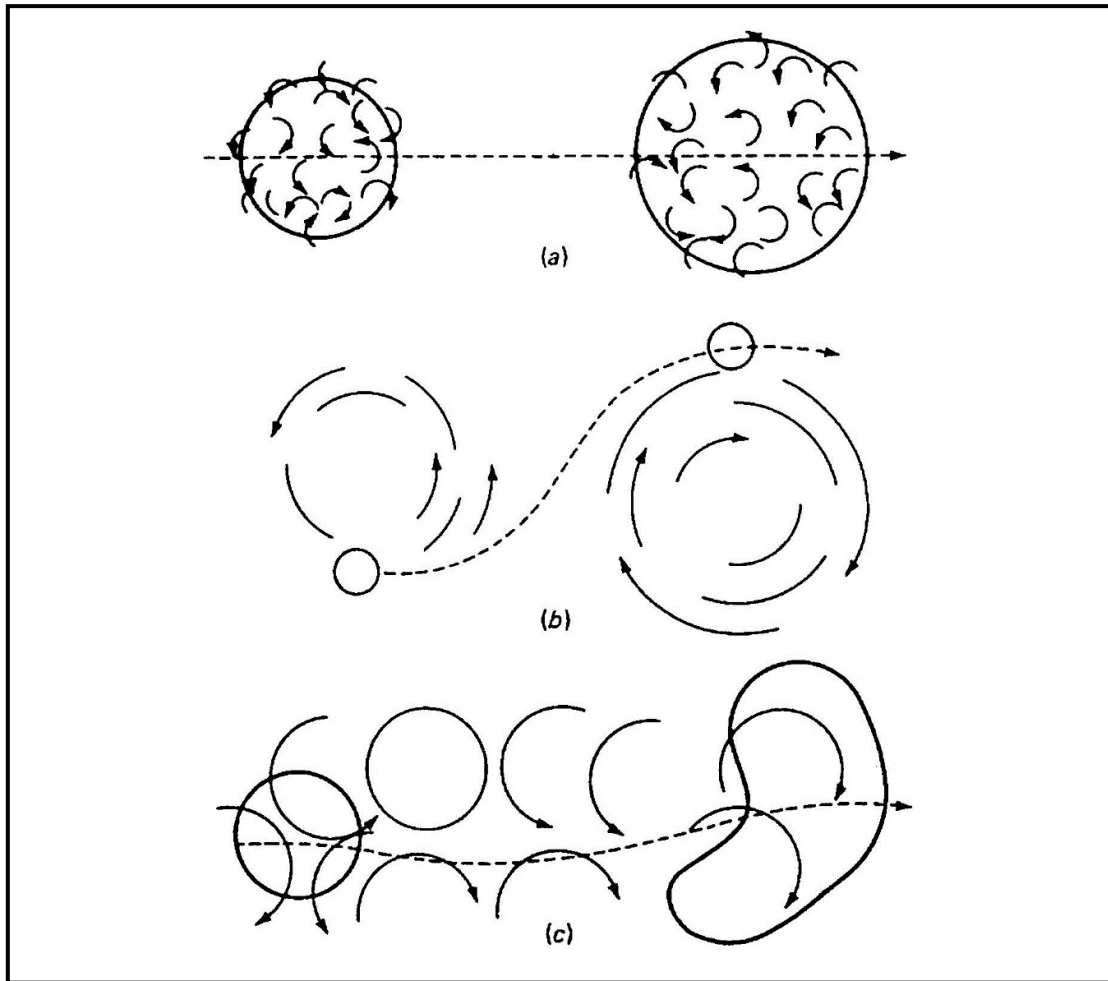


Figure 16 : Dispersion d'une bouffée de produits transportée par l'air, dans trois conditions de turbulence selon Bakum [34])

4.4.3 Interaction nuage - relief – obstacle

S'agissant de la dispersion d'un nuage de produit sur un relief prononcé, l'expérience [38] permet d'admettre que :

- en atmosphère instable ou neutre, le nuage suit les variations du relief. Cela revient à considérer qu'en tout point de l'axe du nuage, la distance verticale est constante, égale à la hauteur effective initiale du rejet ;
- en atmosphère stable, le nuage reste horizontal et contourne le relief si la hauteur de celui-ci est supérieure à la hauteur effective du rejet.

Les interactions entre l'obstacle et le nuage rejeté accidentellement sont à étudier au cas par cas car ils dépendent de la géométrie des obstacles (rapport entre la largeur W et la hauteur H pour des obstacles parallélépipédiques), de la nature du rejet, de la distance de celui-ci à l'obstacle. L'influence de l'obstacle est d'autant plus marquée que le nuage incident a un comportement lourd [21]. Les situations de vent faible et les situations de forte stabilité accroissent également l'influence de l'obstacle, qui sera plus difficilement franchi. Dans la plupart des cas on peut observer :

1) en amont de l'obstacle :

- une diminution de la vitesse, accompagnée d'une élévation de la vitesse sur les bords et au sommet ;
- un accroissement de la concentration ;

2) en aval de l'obstacle :

- une zone de tourbillons se forme élevant turbulence dans l'écoulement et dans le nuage ;
- la décroissance de la concentration dans l'axe du nuage ;
- le nuage est retardé dans sa dispersion [33].
- l'homogénéité verticale de la concentration ;
- la présence de zones de recirculation ;
- l'effet s'amenuise en champ lointain.

Il est communément considéré [25] que les mécanismes de dispersion sont dégagés de l'influence de tout obstacle au sol à des distances supérieures à 10 fois la dimension caractéristique de cet obstacle dans la direction du vent, ou à 2,5 fois perpendiculairement à cette direction à la fois dans le plan horizontal et dans le plan vertical.

Pour un observateur éloigné et situé au niveau du sol, les turbulences induites par un bâtiment proche de la source engendrent une dilution initiale du rejet à peu près homogène dans le sillage de l'obstacle. Le rejet peut alors être considéré comme ayant des dimensions initiales non nulles, de l'ordre de celle de l'obstacle.

La vitesse du vent et la densité du gaz rejeté jouent des rôles particulièrement importants. Ainsi, plus le vent est fort et le gaz léger, moins la présence de l'obstacle se fait sentir. Les situations de vent faible et les situations de forte stabilité accroissent également l'influence de l'obstacle, qui sera plus difficilement franchi. La campagne expérimentale Thorney Island Phase II [22] est une des références expérimentales ayant permis d'observer l'influence d'obstacles, typiquement des murs pleins ou des écrans poreux en arc de cercle situés à 50 m de la source. Des effets de « blocage » du nuage, de dilution en aval du mur plein (2D) et de retardement du transport du nuage ont été observés dans ces essais.

D'après Britter & McQuaid [24], la zone de formation de tourbillons peut atteindre jusqu'à 10 fois la hauteur d'un obstacle 2D (type mur), quand elle sera de deux fois la hauteur de l'obstacle si celui-ci est aussi large que haut.

En aval d'un champ d'obstacles, pour une source ponctuelle de petite taille comparé à celui d'un obstacle individuel, il a été constaté [26] durant la campagne MUST (Mock Urban Setting Trial, quadrillage d'obstacles pour lesquels $W/H = 8$), que l'élargissement latéral et vertical du panache est plus élevé (facteur de 2 à 4) par rapport aux cas de rejets en terrain libre avec les mêmes conditions de stabilité atmosphérique. Plus loin en aval, cet élargissement est ensuite comparable. Durant cette campagne où les obstacles sont considérés bas, les concentrations dans le champ d'obstacles sur l'axe du panache sont 5 à 10 à fois plus faibles par rapport aux cas en terrain libre dans les mêmes conditions de stabilité atmosphérique. Cela contraste fortement avec des observations expérimentales obtenues antérieurement (cf. [27], [28]) avec des obstacles cubiques où les concentrations étaient comparables à celles du cas en champ libre. Dans le champ lointain ($x > H \approx 30$), la décroissance de la concentration observée, au cours des essais de la campagne MUST, est plus faible que dans un environnement dégagé dans les mêmes conditions atmosphériques.

Pour un point situé en altitude (telle une habitation située sur un bâtiment en hauteur), des travaux de modélisation [29] montrent la sensibilité des niveaux de concentration à la position du rejet en amont du champ d'obstacles.

Dans le cas d'un gaz explosible, la présence de l'obstacle dans le champ très proche (cas du jet impactant) favorise le mélange et la turbulence au sein du nuage ce qui peut amplifier les effets de l'explosion.

5 Recensement d'outils de calculs pour simuler la dispersion atmosphérique d'un produit toxique/inflammable

En préambule de la description des outils de calculs pour simuler la dispersion atmosphérique, le périmètre d'étude de ce rapport est défini ici par :

- le domaine d'application des outils ;
- une description synthétique des familles de modèles ;
- les pré requis exigés par les études réglementaires.

Les outils de la dispersion atmosphérique seront présentés dans le présent chapitre et analysés au regard de leur aptitude et limitations pour leur domaine d'application ainsi défini :

- le contexte d'utilisation : urgence, étude réglementaire d'EDD (circulaire du 10 mai 2010¹⁷), des études de cas d'accidents passés ;
- la nature de la substance libérée accidentellement ;
- le type de rejet (flaque, jet sous pression, ...) ;
- l'environnement direct de la zone émissive, telle la présence d'obstacles sur un site industriel, impactant l'écoulement local ; l'environnement plus lointain, telle la topographie où l'écoulement atmosphérique devient prépondérant ;
- les conditions météorologiques,

par les données de sortie :

- le champ de concentration dans le domaine d'étude considéré en fonction du temps permettant dans une étape de post traitement (non présentée dans ce rapport) d'estimer les calculs d'effets toxique ou/et inflammables.

Les distances d'intérêt sont au maximum de quelques kms et correspondant à des échelles de temps de l'ordre de quelques dizaines de secondes à quelques dizaines de minutes.

Une classification des modèles mathématiques déterministes de dispersion atmosphérique pour l'étude de rejets accidentels est représentée sur la Figure 17 avec les définitions et les renvois aux chapitres dédiés correspondants ci-dessous :

- modèles dits « gaussiens » car reposant sur une formulation analytique de distribution gaussienne de la concentration (cf. sous-chapitre 5.1) ;
- modèles dits intégraux (cf. sous-chapitre 5.2) décrivant les propriétés globales (propriétés intégrales) d'un écoulement ;
- modèles eulériens CFD pour « Computational Fluid Dynamics » (cf. sous-chapitre 5.3) basés sur les équations de Navier -Stokes, où la représentation de type eulérienne consiste à suivre le mouvement de l'élément rejeté (gaz, aérosols liquide ou solide) par rapport à un repère fixe ;
- les modèles « Lagrangian Particles Dispersion Model » / Modèle de dispersion lagrangien particules (cf. sous-chapitre 5.4) (LPDM) où la représentation est lagrangienne et consiste à suivre le mouvement de l'élément rejeté par rapport au mouvement moyen de la masse d'air ;
- les modèles « Lattice-Bolzman » (cf. sous-chapitre 5.5) qui consistent, suivant la théorie cinétique des gaz (Boltzmann), à modéliser de manière statistique la dynamique de particules représentant l'écoulement du rejet ;
- des approches SPH pour « Smoothed Particle Hydrodynamics » qui fait partie des méthodes particulières de résolution sans maillage (cf. sous-chapitre 5.3.2.1) où la particule, porteuse d'informations, permet la représentation du milieu fluide modélisé.

¹⁷ https://aida.ineris.fr/sites/default/files/fichiers/Circulaire_COB_V5b_compact.pdf

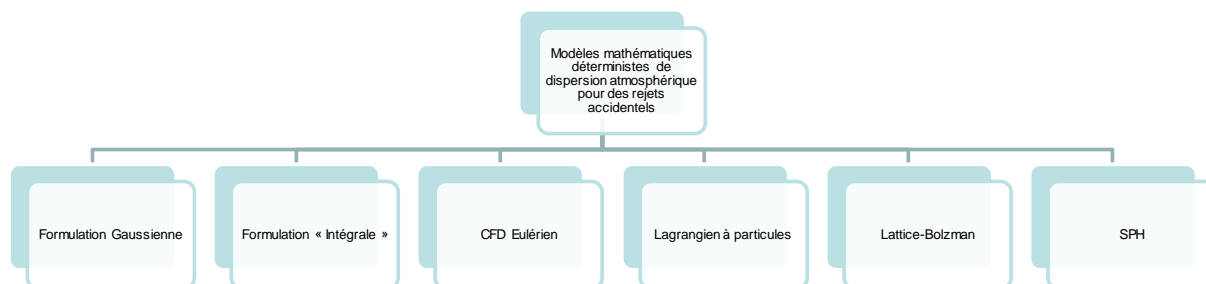


Figure 17 : Classification des modèles mathématiques déterministes de dispersion atmosphérique pour l'étude de rejets accidentels

A ce stade du présent rapport, le lecteur dispose des connaissances afin que les exigences de la réglementation, en termes de données d'entrée d'un scénario accidentel, puissent être détaillées.

Dans la rubrique (fiche 2 et fiche 5) de la circulaire du 10 mai 2010, sont précisées les recommandations relatives au choix des conditions météorologiques dans le cadre des études de dangers (réglementation française). Les conditions de stabilité atmosphérique généralement retenues pour des rejets au niveau du sol de type D (neutre) et F (très stable) au sens de Pasquill, respectivement associées à des vitesses de vent de 5 et 3 m/s. Pour les modèles les plus simples (gaussiens, intégraux) ces classes de Pasquill constituent bien souvent une entrée directe. Pour les modèles plus sophistiqués (modèles 3D), un travail d'harmonisation et de transposition a été réalisé ([89], [90]) pour configurer des profils atmosphériques d'entrée à partir de conditions météorologiques définies par les classes de Pasquill.

Ce chapitre a pour objectifs :

- de présenter un état de l'art des familles de modèles de dispersion atmosphérique dans le cadre de rejets accidentels au moyen de leur formulation mathématique ;
- de situer pour chaque famille de modèles les domaines d'applications ;
- et de référencer les guides de bonnes pratiques existantes.

Relativement au domaine d'application, on peut illustrer cela par le cas d'un jet sous pression d'un produit toxique ou inflammable dans un milieu encombré, la modélisation devra appréhender les processus physiques intervenant dans :

- un sous-domaine en amont de la zone de rejet pour lequel les profils de turbulence et de vitesses atmosphériques doivent être en équilibre et représentatifs de l'état de l'atmosphère et de rugosité de la surface rencontrée ;
- un sous-domaine où prédomine la turbulence générée par le rejet ;
- un sous-domaine de turbulence liée aux obstacles éventuels ;
- un sous-domaine en aval des obstacles où la turbulence atmosphérique va de nouveau prédominer.

Par exemple certains des modèles peuvent appréhender l'ensemble des processus, d'autres modèles ont la capacité à simuler uniquement le sous-domaine en aval des obstacles.

5.1 Modèles gaussiens

5.1.1 Domaine d'application des modèles gaussiens

Le modèle gaussien s'applique aux rejets de gaz passifs du point de vue de l'écoulement, le produit rejeté doit donc avoir :

- une densité à peu près égale à celle de l'air (ou bien il est très dilué) ;
- une température identique à celle de l'air ;
- une vitesse initiale relative nulle.

La formulation des modèles gaussiens s'appuie sur un champ de concentration tridimensionnel généré par une source ponctuelle. La turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité.

La vitesse du vent doit être d'au moins 1 à 2 m/s. Les outils plus élaborés peuvent considérer la variation de la vitesse du vent, de la température de l'air et de la densité de l'atmosphère avec l'altitude. Une couche d'inversion de température peut parfois aussi être prise en compte.

Le terrain doit être homogène et plat puisque la présence de reliefs, d'obstacles (murs, bâtiments...) introduit des perturbations de l'écoulement de l'air (zone de recirculation, ...) qui ne sont pas pris en compte par cette formulation. Toutefois il existe des modèles gaussiens [71] pilotés par des pré processeurs qui simule (formulation analytique) ce type d'écoulement (zone de recirculation, ...).

Les résultats sont valables au-delà d'au moins 100 m depuis le point de rejet. Par ailleurs et comme dit précédemment [38], au-delà de distances de dispersion de l'ordre de la dizaine de kilomètres, les résultats ne sont plus valables car d'autres phénomènes de turbulence et de diffusion doivent être considérés.

5.1.2 Formulation

Un gaz passif va se disperser du fait de la seule action du fluide porteur, l'air. Le transport et la diffusion du gaz vont alors dépendre du vent et de la turbulence atmosphérique d'origine mécanique ou thermique.

Lors du développement d'un nuage de gaz, la concentration du produit est supposée suivre une distribution gaussienne [50] le long des plans perpendiculaires (voir la Figure 18) à la direction du rejet sous les hypothèses d'une diffusion moléculaire négligeable¹⁸, d'une diffusion turbulente homogène et isotrope, et d'un champ de vent uniforme dans l'espace. Selon le type de rejet envisagé, instantané ou continu, des formulations différentes de la concentration sont employées mais les paramètres « clef » demeurent les écarts-types qui paramètrent la dispersion due à la turbulence atmosphérique.

¹⁸ La diffusion moléculaire est de 10^3 à 10^4 inférieure à la diffusion turbulente.

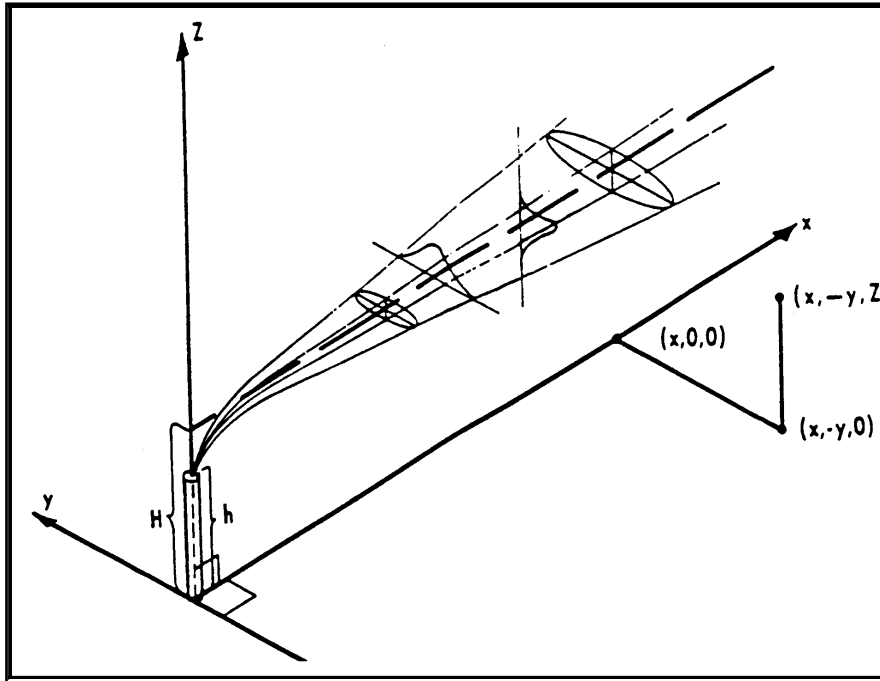


Figure 18 : Répartition gaussienne de la concentration dans un panache de gaz passif (Turner, [50])

Si le rejet est continu (voir le chapitre 4.3.2) et si la vitesse de vent est suffisamment importante pour que le phénomène de diffusion dans la direction du vent soit négligeable devant le phénomène de convection, la concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x, y, z) peut s'écrire :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z + z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]$$

Équation 2 : formulation gaussienne

- Q : débit de polluant [kg/s^3] ;

- M : masse de produit libéré [kg] ;

$\left. \begin{array}{l} x_0 \\ - y_0 \\ z_0 \end{array} \right\}$: coordonnées de la source de produit [m] ;

$\left. \begin{array}{l} x \\ - y \\ z \end{array} \right\}$: coordonnées du point où l'on calcule la concentration [m] ;

- u : vitesse moyenne du vent [m/s] ;

- t : temps depuis l'émission du gaz ;

$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \\ - \sigma_y \\ \sigma_z \end{array} \right\}$: écarts-types de la distribution gaussienne de la quantité M de gaz par rapport à sa localisation

à l'instant t [m] ;

- α : coefficient de réflexion au sol¹⁹.

L'utilisation de l'approche gaussienne impose la détermination des écarts-types. Des formulations sont proposées en Annexe 1 pour le cas des rejets instantanés et des modèles dits à bouffées.

Le chapitre qui suit introduit la théorie de diffusion de Taylor et la relation entre la formulation gaussienne et les approches eulériennes.

5.1.2.1 Relations entre la formulation lagrangienne gaussienne et les approches eulériennes et théorie de diffusion de Taylor

La représentation eulérienne de la dispersion est la suivante pour un point source dans les trois dimensions

$$\frac{\partial C}{\partial T} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) + q$$

Équation 3 : représentation eulérienne de la dispersion eulérienne (advection – diffusion)

Avec :

- C la concentration de l'espèce ;
- q le terme source ;
- K le coefficient de diffusion.

En considérant un vent moyen, une turbulence homogène et stationnaire dans le temps, la solution obtenue prend la forme :

$$c(x) = \frac{q}{4\pi(K_{yy}K_{zz})^{1/2}x} \exp\left(-\frac{v_x}{4x}\left(\frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}}\right)\right)$$

Équation 4 : solution de la dispersion eulérienne pour vent moyen, une turbulence homogène et stationnaire

On constate qu'elle est équivalente à une distribution gaussienne (Équation 2) vue précédemment et réécrit sous sa forme la plus simple :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Équation 5 : formulation gaussienne

¹⁹ Un terme de réflexion au sol peut être pris en compte pour modéliser la capacité de réflexion ou d'absorption du produit sur le sol, l'eau ou les végétaux. De façon évidente, ce phénomène est plus ou moins accentué suivant la nature du produit et l'environnement. $\alpha = 0$: absorption totale et $\alpha = 1$: réflexion totale pour un sol non poreux avec un produit ne pouvant réagir avec ce sol ou la végétation (un gaz comme l'air sur du béton).

Il reste à estimer, l'écart-type sigma (σ), d'après la théorie de diffusion de Taylor [44] :

- près de la source, on a $\sigma=ut$, soit l'écart type σ est proportionnel au temps t , lorsque t le temps de transport tend vers 0 ;
- loin de la source l'écart type σ est proportionnel à $t^{1/2}$ avec t le temps depuis l'émission.

L'écart-type évolue donc plus rapidement près de la source que loin de la source, comme l'illustre la Figure 19.

Ainsi, pour un panache continu lorsque le temps de transport augmente, le taux de diffusion décroît. Les mouvements des particules sont d'abord linéaires avec le temps parce que le mouvement des particules est influencé par leur vitesse initiale. Par la suite, le mouvement des particules est peu influencé par leur mouvement initial et le problème se réduit à un problème de Monte Carlo avec σ proportionnel à $t^{1/2}$. Les modèles gaussiens ont pallié ce problème en introduisant une paramétrisation des écarts-types qui prend en compte les deux régimes et la transition continue de l'un vers l'autre, sur la base d'expériences dont celle de Prairie Grass (décrite plus loin).

En considérant $u = x t$, on constate que l'Équation 4 et l'Équation 5 sont équivalentes pour avec $\sigma^2 = 2Kt$. L'approche eulérienne est ainsi bien adapté au long temps de trajet mais moins adapté au temps de trajet faible [102].

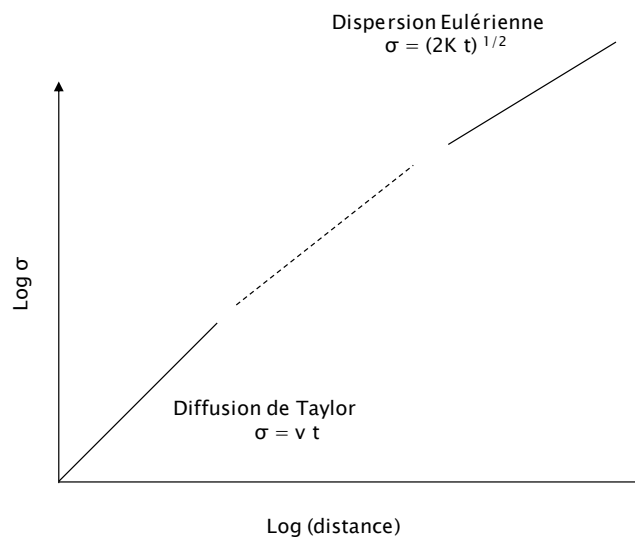


Figure 19 : Evolution des écarts types suivant la Théorie de Taylor

Il est à noter que la diffusion du nuage dépend de sa taille car une fois que la taille du nuage ou du panache englobe la plupart des tourbillons (cf. Figure 15), la dispersion relative est égale à la dispersion absolue et la dispersion lagrangienne est alors équivalente à la dispersion eulérienne.

5.1.2.2 Historique et analyse critique des écart-types

Les premières valeurs des écarts-types ont été mises au point par Pasquill sur la base de résultats expérimentaux issus en grande partie des résultats obtenus lors du projet Prairie Grass [52]. Les écarts-types furent ensuite adaptés par Gifford ([54], [55], [55]) en fonction de la distance d'éloignement de la source de rejet. Cette campagne d'essais de rejets (sur des durées de 10 min et pour des débits inférieurs à 100 g/s) et de mesures de SO_2 a été réalisée sur un terrain plat, bien dégagé, peu rugueux (de l'ordre de 3 cm). Les rejets ont été réalisés près du sol et les concentrations furent mesurées pour des distances inférieures à 1 km. Les valeurs d'écarts-types mis au point dépendent de la distance pour une classe donnée de stabilité de Pasquill. Il est important de mentionner que ces fonctions reflètent la dispersion observable au-dessus d'un terrain équivalent à la campagne de Prairie Grass (non rugueux) et représente des valeurs moyennes pour quelques minutes. Hanna [38] rappelle que la forme de la fonction a été extrapolée à des distances supérieures (jusqu'à 10 km) par supposition et il ajoute qu'elles pourraient fonctionner sous certaines conditions idéales mais il y a peu d'éléments au niveau des observations pour le valider.

Il existe des relations (cf. Annexe 2) basées :

- sur des résultats empiriques ;
- ou déduites de la théorie de diffusion de Taylor, pour donner des valeurs des écarts-types fonction :
 - de la distance d'éloignement de la source de rejet ([52][52],[53],[54],[55],[57],[60]);
 - ou encore du temps de transfert ([56]). Pour des temps de transfert importants, l'écart-type horizontal devient indépendant de la stabilité atmosphérique car la turbulence de grande échelle prévaut.

Différentes approches ont été proposées par la suite, où l'on a par exemple, des valeurs des écarts types :

- σ proportionnel [23] à σ_{wind} et F :
 - avec F les fonctions universelles de la couche limite atmosphérique ;
 - avec σ_{wind} l'écart-type des fluctuations du vent ,
- ou bien dépendent du temps de diffusion et leur croissance en fonction de la distance qui dépend principalement de variables météorologiques comme le nombre de Richardson et les caractéristiques du vent.

de sorte que ces paramétrisations ont l'avantage de ne pas dépendre de résultats d'expériences de dispersions spécifiques à un site donné et d'être moins limitées en termes de distances par rapport à la source.

Enfin, il convient de souligner que l'effet de stabilité atmosphérique sur les écarts-types est moins important dans la direction horizontale que dans la direction verticale où la gamme des tourbillons concerne uniquement la petite échelle et les écarts-types sont toujours fonction de la distance de transfert.

D'autres auteurs ([63],[64]) ont proposé des corrections suivant la rugosité pour étendre le domaine de validité à des sols plus rugueux ou/et à d'autres durées d'observation.

Les modèles gaussiens dits « de deuxième génération » n'utilisent pas les classes de stabilité comme c'est le cas pour les modèles gaussiens traditionnels mais s'appuient sur une approximation élaborée de la turbulence atmosphérique faisant intervenir la vitesse de frottement et les transferts thermiques. Ils emploient ainsi une approche continue de la stabilité atmosphérique beaucoup plus réaliste lorsqu'il s'agit de simuler des cycles diurnes par exemple. Ils incorporent une paramétrisation théorique de la couche limite atmosphérique suivant la théorie de Monin Obukhov et en déclinent une formulation mathématique des coefficients de dispersion. La supériorité de cette approche, notamment en situation de forte convection²⁰, lorsque le panache n'est plus gaussien [65], est admise.

Différences entre les outils gaussiens

Il est à retenir que la pertinence d'un modèle gaussien dépend principalement d'une estimation correcte des écarts-types qui traduisent la diffusion latérale (σ_y), verticale (σ_z), et longitudinale (σ_x) du nuage.

Les écarts pouvant être observés entre les différents outils résident a priori sur la façon de prendre en compte les différentes échelles de turbulence atmosphérique. Les mécanismes de dispersion sont en effet différents dans le champ proche, où ce sont surtout les petites structures de l'écoulement qui conditionnent la dispersion, tandis que dans le champ lointain, ce sont les grandes structures de la turbulence atmosphérique qui pilotent la dispersion.

En résumé, les écarts types de la loi gaussienne dépendent (cf. Annexe 2) :

- de la distance à la source ou de la durée de transfert ;
- des caractéristiques de la structure de l'atmosphère ;
- et de la rugosité du site.

²⁰ En situation de fort rayonnement solaire, le réchauffement des couches de l'atmosphère situées près du sol génère des mouvements convectifs ascendants dans l'atmosphère.

Les modèles de type gaussien ne donnent pas nécessairement tous les mêmes résultats du fait des différentes approches retenues pour la détermination des écarts-types (cf. chapitre précédent : Pasquill-Turner, Briggs, Doury).

Aussi, certaines considérations relatives à la caractérisation de la turbulence atmosphérique doivent être gardées en mémoire pour le choix de la paramétrisation des écarts-types vis-à-vis du problème étudié :

- Ainsi, le spectre de turbulence est décrit par des formulations empiriques qui s'appuient sur des considérations de similitude. Les lois de similitude prévoient que l'énergie turbulente augmente avec la vitesse du vent. Lorsque la vitesse du vent tend vers zéro, la théorie conduit à considérer que la turbulence tend vers zéro.
- Néanmoins, les lois de similitude ne s'appliquent pas à des turbulences de grande échelle. Même si la vitesse du vent tend vers zéro, une turbulence résiduelle constituée de basses fréquences persiste dans l'atmosphère. Cette turbulence ne dépend pas de paramètres locaux.
- Lorsque la turbulence de petite échelle prédomine, toutes choses égales par ailleurs, lorsque la vitesse du vent augmente, l'énergie de mélange est plus importante, mais en contrepartie il faut moins de temps pour atteindre un point donné. Ces deux effets se compensent sur une distance de transfert donnée, la diffusion reste la même quelle que soit la vitesse du vent. Autrement dit, l'écart-type de la répartition du produit dépend de la distance de transfert et non de la vitesse à laquelle est parcourue cette distance.
- Lorsque la turbulence de grande échelle prédomine, c'est-à-dire dans le cas de distances de transfert importantes (la diffusion de nuage de grandes dimensions est régie par des structures de grande taille) ou des situations de vent faible (la turbulence de petite échelle est faible), les écarts-types dépendent du temps de transfert et non de la distance.
- Autrement dit, pour les temps de transfert courts, la turbulence de petite échelle joue un rôle non négligeable. En revanche, pour les temps de transfert importants, la turbulence de grande échelle devient dominante.
- Les formules des écarts-types ont été établies sur la base de résultats expérimentaux représentatifs d'une situation moyenne dans le temps s'étendant de quelques minutes à une heure. Les valeurs des écarts-types reflètent donc la dispersion pour un milieu de nature équivalente au site expérimental.

5.1.3 Quelques recommandations

En préambule, il est important de rappeler que les modèles gaussiens les plus couramment utilisés permettent de calculer uniquement des concentrations moyennes (désignées par \bar{C}) en fonction d'un effet de meandering moyenné sur un « averaging time » (cf. Annexe 2) mais ne sont pas destinés à appréhender les effets transitoires résultant de la dynamique du meandering et/ou des fluctuations turbulentes de la concentration autour de la valeur moyenne. Or dans certaines conditions, les concentrations instantanées sur une période d'exposition aux fluctuations peuvent atteindre bien plus de 10 fois la valeur moyenne de la concentration. Pour des valeurs de n bien supérieures à 1, la seule utilisation de la concentration moyenne peut conduire à sous-estimer la dose toxique [66]. Ces aspects relatifs aux fluctuations de concentrations sont abordés au chapitre 1.

Cette limitation des modèles conduit au calcul de dose, nommé I_{moy} suivant la relation :

$$I_{moy} = \bar{C}^n t_{exp}$$

Equation 6 : expression de la dose toxique

avec :

- \bar{C} , la valeur (ppm) de concentration moyenne durant ;
- t_{exp} , la durée d'exposition (min) ;
- n , exposant de Haber, caractérisant la toxicité de la substance recherchée (relation dose-effet).

Dans l'hypothèse où la cible est exposée à la totalité de la durée de passage du nuage, une pratique courante consiste à estimer une durée d'exposition équivalente à la durée de passage du nuage toxique modélisé.

Le calcul des concentrations moyennes au moyen de l'averaging time du modèle montre (cf. Annexe 2) la dépendance du calcul de dose et des distances d'effets au choix de l'averaging time.

Dès lors le choix de la valeur de l'averaging time, lorsqu'il est proposé à l'utilisateur, peut être parfois sensible dans l'utilisation du modèle dans les cas où le calcul de dose toxique (Equation 6) est dominé principalement par la valeur de la concentration, du fait d'une valeur élevée de l'exposant n, plutôt que par la durée d'exposition.

Le guide CCPS [69] recommande d'utiliser un averaging time en adéquation avec une durée représentative du danger étudié et toujours inférieur ou égal au temps d'exposition. Dans le domaine de la mesure qualité de l'air intérieure [WHO guidelines for indoor air quality: selected pollutants, 2010], la démarche est la même car certaines des valeurs d'averaging time recommandées sont inférieures ou de l'ordre de 10 min afin d'être en adéquation avec les durées d'exposition limites liées aux produits les plus toxiques. Des recommandations sont également présentées dans le rapport intitulé 'Bonnes pratiques pour l'utilisation des seuils de toxicité aiguë par inhalation dans le cadre des études réglementaires' et référencé INERIS-DRA-10-109949-12423A [70].

Dans le cas de la formation d'un nuage inflammable (UVCE : Unconfined Vapor Cloud Explosion), celui-ci peut être quasi instantanée alors que la formation d'un nuage toxique peut s'étendre de quelques minutes à plusieurs dizaines de minutes. Une valeur minimale d'averaging time ou d'averaging time instantané de l'ordre de 20 s [Lees, 1996] est souvent utilisée. Cela revient à considérer que la concentration instantanée peut être 2 fois inférieure à une concentration moyennée sur 10 minutes avec

la relation $\left(\frac{t_{av}}{t_{ins}}\right)^P$ avec $t_{ins} = 18,75$ s et $t_{av} = 10$ min.

5.2 Modèles intégraux

Une définition d'un modèle intégral est donnée par Ivings [68], elle est composée de quelques équations, en partie phénoménologiques, décrivant les propriétés globales (propriétés intégrales) d'un écoulement.

5.2.1 Domaine d'application

Du fait de leur capacité à simuler de nombreux phénomènes dans le champ proche et dans le champ lointain du rejet, le domaine d'application est plus large que les modèles gaussiens au niveau de la nature de la substance libérée accidentellement et du type de rejet. La restriction relative à l'environnement direct de la zone émissive est toujours présente, les modèles intégraux ne permettent de simuler la dispersion atmosphérique que sur un terrain plat et sans obstacles.

5.2.2 Formulation générale

Lorsque le rejet est tel qu'il perturbe l'écoulement atmosphérique de l'air, l'emploi d'un modèle gaussien est inadapté. Des mécanismes physiques non pris en compte par les modèles gaussiens sont considérés tels :

- les effets de turbulence dynamique, pour les rejets sous forme de jet à grande vitesse d'émission ;
- les effets de gravité, pour les rejets de gaz lourds ;
- les effets de flottabilité pour les rejets de gaz légers.

L'emploi d'un modèle intégral permet de modéliser ces mécanismes. Ce type de modèle est basé sur les équations de la mécanique des fluides (conservation de la masse, de la quantité de mouvement, d'énergie et d'espèces) dont le système d'équations est suffisamment dégénéré pour permettre une résolution rapide. Cette approche conduit dans la plupart des modèles intégraux à la résolution d'un système d'équations différentielles ordinaires (et non partielles). Cela conduit à des temps de calculs beaucoup plus courts. La conservation des scalaires est assurée par l'intégration au sein du volume délimité par la surface du nuage d'où "approche intégrale". La description mathématique de certains processus est basée sur des hypothèses d'auto-similarité ou d'auto-similarité approchée. Cette simplification se traduit par l'introduction de paramètres représentant globalement les mécanismes non modélisés. Par exemple, la vitesse d'entraînement de l'air ambiant dans un jet gazeux sous-pression est simulée par des fonctions et des coefficients empiriques ; la turbulence complète du jet n'est donc pas modélisée. De même, pour la modélisation des nuages de gaz passifs, soit dès leur rejet ou bien après une dilution suffisamment importante qui donne au nuage un comportement passif dans le champ lointain, la vitesse d'entraînement est déduite des écarts types (cf. chapitre 5.1.2) des modèles gaussiens. La description mathématique de la dispersion du gaz lourd (l'effondrement du nuage), ainsi que les processus d'advection et de mélange turbulent sont intégrés directement dans la résolution des équations de conservation. Il est bon de garder à l'esprit que la modélisation des rejets stationnaires de gaz lourds demeure complexe par l'intermédiaire de cette approche car elle fait appel à des hypothèses de stationnarité forfaitaires [49].

Ces modèles comprennent, dans la plupart des cas, un module de calcul permettant de déterminer le terme source de rejet en fonction des conditions de stockage du produit et du type de rejet (rupture guillotiné, ruine du réservoir, évaporation de flaque...) [71].

5.2.3 Paramétrisation des équations

La mise au point des modèles de type intégral passe :

- d'une part, par la paramétrisation de certaines équations de la mécanique des fluides et la sélection de méthodes numériques de résolution ;
- et d'autre part, par le calage des paramètres introduits dans le système d'équations.

Chaque outil utilise une mise en équation spécifique et qui lui est propre pour chacun des mécanismes physiques modélisés (effets de gravité des gaz lourds, effets dynamiques des jets turbulents...).

L'approche globale retenue par la plupart des outils intégraux est présentée ci-après de façon synthétique sachant que la mise en équation des mécanismes considérés pourra être trouvée dans les manuels théoriques accompagnants la majorité des logiciels de dispersion.

5.2.3.1 Rejets instantanés

Pour la modélisation de la dispersion d'un rejet instantané, le modèle suit le rejet dans son ensemble, soit le nuage résultant mais aussi par exemple l'évolution de la nappe formée au sol.

Les résultats donnent la position et les propriétés au centre du nuage à différents instants après le rejet. Le nuage est généralement supposé avoir une section horizontale circulaire et une section transversale verticale circulaire si le nuage est élevé et de forme elliptique tronquée si le nuage touche le sol et s'effondre.

5.2.3.2 Rejets continus

Pour la modélisation de la dispersion d'un rejet continu, le modèle considère un panache totalement développé dans lequel le produit est encore en train d'être rejeté. Le modèle permet de modéliser à la fois dans l'espace et dans le temps ce panache et son mode d'alimentation (tel un jet sous pression par exemple).

Les résultats donnent les caractéristiques des sections transversales situées le long de l'axe de ce panache (dimensions, concentrations, temps nécessaire pour atteindre la section depuis le point de rejet...).

La section transversale est généralement considérée comme circulaire si le nuage est élevé ou elliptique si le nuage touche le sol et s'effondre.

Puisque la modélisation d'un rejet continu est seulement valable après que le panache se soit totalement développé, si le rejet est relativement court ou encore de durée limitée, le modèle doit alors considérer le développement partiel du panache et ajuster ses calculs de façon adéquate.

5.2.3.3 Rejets de durée limitée

La modélisation des rejets de durée limitée considère ces rejets comme des rejets instantanés, c'est-à-dire comme une masse rejetée au lieu d'un débit de rejet.

Toutefois, il n'est pas possible de prévoir à partir des données d'entrée si le rejet continu va conduire ou pas à un panache totalement développé. Aussi le modèle commence toujours par une modélisation de rejet continu. A chaque pas de temps après l'arrêt du rejet, il vérifie si le nuage ne présente pas au global les caractéristiques d'un rejet instantané. Si tel est le cas il remplace le nuage continu par un nuage équivalent circulaire. Cette approche est qualifiée de quasi-instantanée.

Les nuages continus et instantanés ont des formes très différentes. Le passage vers une approche quasi-instantanée peut conduire à des discontinuités dans les résultats. La concentration en un point donné peut de ce fait changer de façon abrupte à l'instant du changement. Il est malgré tout possible de pallier ce problème en utilisant des facteurs de correction pour modifier les résultats du modèle continu en une façon qui reflète l'étalement et l'entraînement de la tête et de la queue du nuage.

5.2.3.4 Déplacement du nuage

Le déplacement et le développement géométrique du nuage sont calculés en fonction de sa quantité de mouvement. Plusieurs facteurs vont intervenir successivement ou simultanément :

- quand le nuage est en contact avec le sol ou atteint une couche d'inversion, la composante verticale de la quantité de mouvement est transformée en composante horizontale, ce qui se traduit par une augmentation de la largeur du nuage ;
- si le nuage est plus lourd que l'air, il va s'effondrer sur le sol ce qui va générer de la turbulence, entraîner de l'air et changer sa section transversale circulaire en une ellipse tronquée. Le sol exerce une force de frottement sur les zones du nuage qui sont en contact, ce qui diminue la quantité de mouvement du nuage ;
- si un nuage au sol a une densité suffisamment petite par rapport à celle de l'air alors le nuage peut décoller du sol ;
- la quantité de mouvement va être perdue progressivement du fait de l'entraînement de l'air et de l'éventuel frottement du nuage avec le sol. Le nuage est par la suite entraîné par le vent.

5.2.3.5 Dilution du nuage

Plusieurs sources de turbulences vont entraîner de l'air dans le nuage et le diluer. Le modèle considère les sources de turbulences dues :

- à la quantité de mouvement initiale ;
- au cisaillement du champ de vent ;
- à l'effondrement d'un nuage dense ;
- à la turbulence atmosphérique.

Chacun des mécanismes participe à la dilution du nuage avec une intensité différente et variable selon l'évolution des caractéristiques du nuage. A chaque étape de la dispersion, le modèle évalue les mécanismes actifs et calcule un taux d'entraînement d'air total.

Des modèles de type "shallow layer" (littéralement modèle de couche peu profonde) [75] ont été développés pour traiter spécialement les écoulements de gaz lourd. Typiquement les nuages de gaz lourd sont caractérisés par un faible rapport entre leur hauteur et leur largeur. Cela a conduit au développement de modèles basés sur un système décrit par une hauteur de couche, caractérisant l'effondrement du nuage, la densité et une vitesse représentant les composantes latérales et longitudinales. Le modèle résout les équations d'Euler (équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement) en considérant des profils verticaux uniformes de pression suivant la loi

d'hydrostaticité. Ce type de modèle est bien adapté pour appréhender les effets de pentes [91]. Par ailleurs, certains de ces modèles ont été conçus pour simuler l'évolution d'une fraction liquide suite à un rejet diphasique [91].

5.2.3.6 Concentration dans le nuage

L'air est entraîné par les bords du nuage et se déplace graduellement dans le corps du nuage.

Le profil de concentration dans une section du nuage va changer avec le temps. Le profil de concentration varie de façon franche dans les premiers instants de la dispersion pour prendre des variations régulières et monotones au fur et à mesure que la dilution s'opère. Le profil de concentration tend ainsi vers une forme gaussienne lorsque la dispersion devient passive.

Certains modèles donnent comme résultat de concentration une valeur moyennée temporellement pour une hauteur fixe, ou encore la moyenne des concentrations à la verticale du centre de gravité. D'autres modèles plus élaborés fournissent l'évolution de la concentration au sein du nuage.

5.2.4 Prise en compte de la turbulence atmosphérique

Dans ce type de modèle et comme pour les modèles de dispersion passive la turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité atmosphérique, de façon à s'affranchir d'une modélisation lourde de la turbulence.

Le terrain est supposé homogène et idéalement plat. La présence de reliefs, d'obstacles (murs, bâtiments...) introduirait des perturbations complexes de l'écoulement de l'air. Les caractéristiques du terrain sont définies sous la forme d'une seule hauteur de rugosité pour toute la région du rejet.

Le champ de vent est uniforme horizontalement. Dans la plupart des cas, le profil vertical du vent est retenu comme constant dans le temps. Les outils les plus élaborés peuvent considérer la variation de la vitesse du vent, de la température de l'air et de la densité de l'atmosphère avec l'altitude. Une couche d'inversion de température peut parfois aussi être prise en compte.

Comme pour les modèles gaussiens, au-delà de distances de dispersion de l'ordre de la dizaine de kilomètres, les résultats ne sont plus valables car d'autres phénomènes de turbulence et de diffusion doivent être considérés. Les recommandations présentées au chapitre 5.1.3 sont valables dans le cadre des modèles intégraux dès lors que le choix de la valeur de l'averaging time est proposé à l'utilisateur.

5.3 Modèles eulériens CFD basés sur les équations de Navier -Stokes

5.3.1 Notions fondamentales de turbulence

La turbulence dans un fluide est un phénomène complexe difficilement prédictible. Lesieur [76] propose la définition suivante :

- « Premièrement un écoulement turbulent doit être imprévisible au sens où une petite incertitude sur la connaissance de l'état initial va s'amplifier en rendant impossible une prédiction déterministe précise de son évolution.
- Deuxièmement, il doit satisfaire la propriété d'accroissement du mélange. Cela signifie qu'un écoulement turbulent doit engendrer un mélange plus rapide que sous le seul effet de la diffusion moléculaire.
- Troisièmement, il doit impliquer une large gamme d'échelles spatiales».

Si les phénomènes turbulents restent extrêmement complexes, différentes théories ont été développées pour permettre sa compréhension.

Ainsi, suivant la théorie de Kolmogorov (cf. Figure 20), il ressort que :

- la majeure partie de l'énergie cinétique turbulente est contenue dans les plus grandes échelles de la turbulence ;

- les petites échelles sont responsables des phénomènes de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ;
- les transferts d'énergie s'effectuent des grandes échelles vers les petites.

Il est également important de noter que, généralement, les grandes échelles sont anisotropes alors que les petites sont isotropes. C'est en particulier le cas pour les écoulements atmosphériques.

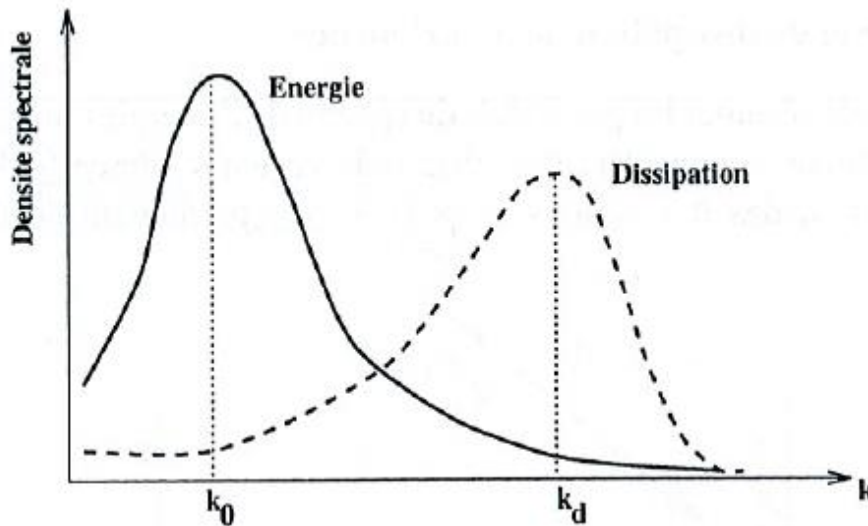


Figure 20: Distribution spectrale de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation scalaire en fonction du nombre d'onde

Sur la base de ces éléments, il est possible de distinguer trois grandes familles de modélisation des phénomènes turbulents :

- la Simulation Numérique Directe (SND ou DNS en anglais : « *Direct Numerical Simulation* »), qui consiste à résoudre de manière explicite, dit autrement à simuler numériquement, soit, toutes les échelles de la turbulence ;
- la Simulation des Grandes Echelles (SGE ou LES en anglais : « *Large Eddy Simulation* »), qui résout explicitement les plus grandes échelles (celles qui contiennent l'énergie de la turbulence) et modélise les petites ;
- les approches moyennées (RANS : « Reynolds Average Navier Stokes ») qui modélisent toutes les échelles de la turbulence ainsi la fluctuation de vitesse n'est pas représentée directement par la réalisation numérique et n'est pris en compte que par un modèle de turbulence.

Il est possible de représenter, de façon schématique, les résultats issus de ces différentes approches par la figure ci-dessous.

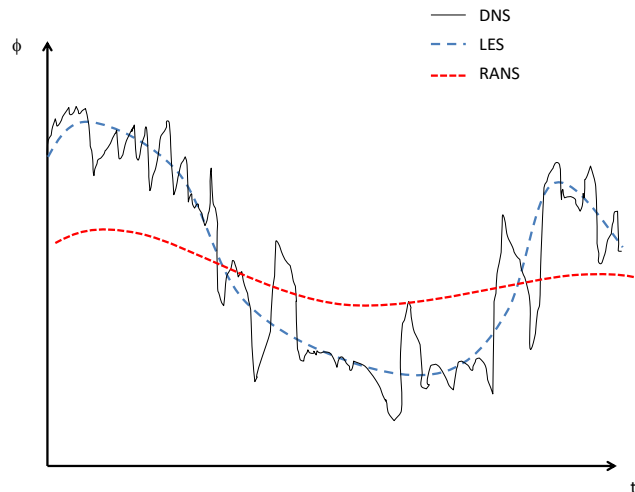


Figure 21: Représentation schématique de l'évolution d'une grandeur physique (ϕ) au cours du temps (t) selon les différentes modélisations de la turbulence

Comme l'indique cette figure, la DNS permet de capturer toutes les fréquences de l'écoulement et ainsi l'ensemble des fluctuations. La LES consiste à filtrer les fréquences les plus élevées mais reproduit les fluctuations liées aux plus grandes échelles. Enfin, l'approche RANS ne fournit que l'information du mouvement moyen. Il convient de noter que les deux premières approches correspondent à une réalisation alors que l'approche RANS correspond à la moyenne statistique d'un grand nombre de réalisations (ou moyenne d'ensemble). En effet la moyenne de Reynolds désigne la moyenne statistique, égale à la moyenne temporelle dans le cas d'une turbulence stationnaire et à condition d'admettre que le processus est considéré ergodique [77]. Si en plus l'écoulement est homogène, les moyennes temporelles et spatiales sont équivalentes. Dans la fermeture RANS, le caractère aléatoire des fluctuations relèvent des processus stationnaires et ergodiques d'ordre deux (cf. [78]).

Le corollaire de cette figure est lié au maillage. Ainsi, la DNS requiert un maillage capable de capturer toutes les échelles de la turbulence, donc y compris l'échelle de Kolmogorov, ce qui impose des maillages conséquents. L'ordre de grandeur du nombre de points total pour une telle simulation est de l'ordre de $Re^{9/4}$, soit 10^{12} mailles pour un écoulement atmosphérique avec $Re \approx 5 \cdot 10^5$.

La précision d'un calcul LES dépend du maillage. L'échelle de coupure doit impérativement se situer dans la zone dite inertielle du spectre de turbulence, zone correspondant au transfert d'énergie entre grandes et petites échelles. A l'extrême, une échelle de coupure au-delà de l'échelle de Kolmogorov fait tendre la simulation vers la DNS.

Les approches de type RANS ne représentant que l'écoulement moyen, les simulations deviennent, au-delà d'un certain seuil, indépendantes du maillage. Ce dernier point doit être vérifié avant l'exploitation d'un résultat en réalisant des simulations pour plusieurs tailles de mailles [89].

5.3.2 Théorie physique, approches mathématiques et adaptation aux écoulements atmosphériques

Pour modéliser les phénomènes de dispersion atmosphérique de substances dangereuses, les modèles numériques eulériennes 3D sont basés sur la résolution des équations de comportement des fluides. De ce fait, ils doivent permettre de prendre en compte l'ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur la dispersion, qu'ils soient liés à l'atmosphère comme la turbulence thermique, ou au site comme les obstacles ou le relief. Différents modèles et les hypothèses associées sont ensuite introduits pour permettre la résolution de ce système d'équations au moyen d'outils de calcul. Le système décrivant le modèle physique est composé d'un système d'équations aux dérivées partielles :

- une équation de conservation de la masse ;
- trois équations de conservation de la quantité de mouvement ;
- une équation de conservation de l'énergie ;

- une équation de conservation des espèces.

Une loi d'état du mélange gazeux permet de fermer le système d'équations.

L'écriture détaillée de ces équations [79][80] ne fait pas l'objet du présent document. La résolution exacte de ces équations étant impossible, elles sont résolues de manières numériques en discrétisant l'espace continu en un ensemble d'éléments discrets. Ce point fait apparaître la notion de résolution numérique [81], traditionnellement au moyen des méthodes de différences finies ou volumes finis [67]. A noter que de nouvelles méthodes de discrétisation apparaissent aujourd'hui, notamment les formulations SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) [159] qui consiste en une discrétisation des équations dans un domaine rendu mobile. Quelques applications apparaissent dans le domaine de la dispersion atmosphérique, notamment en présence de particules [160]. Dans le langage courant l'expression modèle tri-dimensionnel est utilisée pour ces modèles qui résolvent une partie ou l'ensemble du système d'équations ci-dessus qui correspond à un système d'équations différentielles partielles non-linéaires, généralement regroupées sous le terme d'équations de Navier-Stokes. La résolution de ce système nécessite l'utilisation de méthodes numériques, d'où la terminologie Mécanique Numérique des Fluides (MNF) ou "*Computational Fluid Dynamics*" (CFD) en anglais. Les équations sont ainsi résolues en discrétisant l'espace-temps en un maillage tridimensionnel pour l'espace et en itérations successives pour le temps.

La résolution de l'ensemble des échelles, de temps et d'espace, pour un tel système d'équation discrétisé reste impossible. Une telle résolution, de type DNS reste aujourd'hui réservée à des configurations sur des écoulements de plus faibles dimensions [82][83] et n'est pas applicable à des configurations réelles représentatives d'une Couche Limite Atmosphérique du fait d'un maillage (cf. chapitre précédent) couteux en temps de calcul au regard des capacités de calcul à la date de rédaction du présent rapport. Pour les écoulements industriels, deux types d'approches sont possibles :

- les approches moyennées (RANS) qui consistent à résoudre des grandeurs moyennes, au sens statistique, caractérisant l'écoulement ;
- l'approche aux grandes échelles (LES) qui consiste à ne résoudre explicitement que les plus grandes échelles de l'écoulement, les plus petites étant modélisées.

L'idée du présent document n'est pas de détailler chacune de ces approches décrites par ailleurs dans la littérature [84] [85] mais de faire le lien entre les capacités et limites de ces deux types d'approches et les besoins de modélisation des écoulements atmosphériques.

5.3.2.1 Approches moyennées

Les approches de type RANS sont aujourd'hui les plus utilisées dans le monde industriel car elles permettent de minimiser les efforts de maillage et donc les temps de simulation. Ces approches consistent à simplifier la résolution du système d'équations aux dérivées partielles en ne s'intéressant qu'aux grandeurs moyennes. Chaque variable (ϕ) est décomposée, suivant la préconisation de Reynolds [143] en la somme d'une valeur moyenne statistique ($\bar{\phi}$), sur un ensemble de réalisations d'écoulement, et d'une fluctuation (ϕ'), soit $\phi = \bar{\phi} + \phi'$. Le système d'équations alors obtenu fait apparaître des termes supplémentaires, tels que les flux turbulents de vitesse $\overline{u'_i u'_j}$, de température $\overline{u'_i T'_j}$ et de masse $\overline{u'_i C'_j}$. Une modélisation de ces différents termes est nécessaire pour fermer le système d'équations. Parmi les modèles les plus utilisés pour modéliser les flux turbulents, il est considéré l'hypothèse de diffusivité de Boussinesq (1877) qui postule que le frottement turbulent est responsable d'échanges de quantité de mouvement de l'écoulement moyen. Boussinesq postule ainsi que le transfert de la quantité fluctuante f' par la vitesse fluctuante u' dans la direction i est directement proportionnel au gradient de la valeur moyenne de f dans cette direction Cette hypothèse introduit la notion de viscosité turbulente, propriété de l'écoulement et non du fluide, à l'inverse de la viscosité moléculaire. Il convient donc de modéliser cette viscosité turbulente, ν_t .

Les niveaux d'approches disponibles pour la calculer sont les suivantes :

- approche à 0 équation de transport supplémentaire (longueur de mélange Prandtl (1925) ;
- approche à 1 équation de transport supplémentaire (k-l) ;
- approche à 2 équations de transport supplémentaires (k- ϵ , k- ω , ...);

- modèles aux tensions de Reynolds (ou « Reynolds stress model », RSM ou modèle R_{ij}) dans lequel est résolue une équation de transport pour chacune des composantes du tenseur des contraintes turbulentes (on s'affranchit de l'hypothèse de Boussinesq).

Détaillons le modèle $k-\varepsilon$, très utilisé dans les applications de dispersions atmosphériques du fait d'un bon compromis entre la précision et le temps de calcul, la viscosité est calculée par : $\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$ avec :

- k est l'énergie cinétique turbulente : $k = \frac{1}{2} (\overline{u_i' u_i'} + \overline{v_i' v_i'} + \overline{w_i' w_i'})^2$;
- ε le taux de dissipation scalaire ;
- C_μ une constante.

Les modèles $k-\varepsilon$, font apparaître un jeu de constantes à déterminer par l'expérience ou l'analyse dimensionnelle [105]. Il est reconnu qu'il n'y pas de valeurs universelles des constantes qui peuvent dépendre non seulement du type d'écoulement mais également de la zone d'écoulement. L'influence de ces constantes sur les résultats de simulation est conséquente, comme l'ont montré Kim et Patel [106]. Bottema [107] présente une adaptation des constantes en proposant le concept d'une turbulence, notamment en présence d'obstacles, qui contient une part de turbulence active et une autre inactive dont la répartition est inhomogène dans l'espace. Certains auteurs [108] proposent une approche zonale et de désactiver le modèle de turbulence dans le champ proche de l'obstruction.

La plus grande disparité porte sur la constante C_μ . Le modèle $k-\varepsilon$ standard, impose pour C_μ la valeur de 0,09 mais pour atteindre un équilibre de production – dissipation de la turbulence dans une simulation alimentée par des profils de similitude dans la CLS, une valeur de $C_\mu = 0,03$ est préconisée par Duynkerke [101] [104]. L'équilibre ne peut être atteint que si les profils en entrée (profils de vitesse, profils turbulents) sont en cohérence avec le modèle de turbulence (même valeur de C_μ).

D'un point de vue pratique, il n'est pas toujours aisé d'adapter (loi de paroi, codage d'un terme source dans les équations) les codes commerciaux ([100] [109]) aux bons usages et recommandations (cf. [89] afin d'adapter l'usage des modèles 3D aux études réglementaires). En effet, plusieurs auteurs [98][99][100][103] ont montré relativement aux simulations de type RANS $k-\varepsilon$:

- la difficulté à conserver à l'équilibre les profils de vitesse moyenne et de turbulence sur une CLA, en situation neutre ou stratifiée, le long de l'axe de l'écoulement principal sur des parois rugueuses ;
- un affaissement des niveaux de turbulence et de vitesse dans la CLS dans la direction du vent moyen auquel peut être associé un pic d'énergie cinétique turbulente k dans les premiers niveaux verticaux.

Cela s'explique par les lois de paroi proposées dans les logiciels commerciaux qui ne permettent pas de satisfaire les contraintes pour se raccorder à un profil logarithmique de CLA. En modifiant les lois de parois Hargreaves et Wright [99] ont partiellement résolu ces problèmes de conservation des profils amont. Le type de conditions aux limites appliquées au sommet du domaine de calcul est également un facteur sensible. En effet une condition de type symétrie ne permet pas d'apporter le cisaillement nécessaire en haut de la couche simulée afin de maintenir la turbulence. Selon Richards et Hoxey [98]; une condition sur les tensions de Reynolds évite d'observer ce problème, toutefois leurs travaux ont porté sur des cas de situations neutres dans la couche limite de surface.

Rappelons qu'avec les approches $k-\varepsilon$, soit 2 équations de transport de l'énergie turbulente, le spectre d'énergie de la turbulence est réduit à son intégrale, k . Les informations liées aux structures de la turbulence sont donc perdues et notamment les phénomènes anisotropes associés aux grandes structures verticales. Or la turbulence atmosphérique est fortement anisotrope, du fait notamment de l'interaction entre la surface du sol et les effets de flottabilité inhérents au forçage thermique. Cela a été démontrée lors de campagnes expérimentales dédiées à des conditions de fortes stabilités atmosphériques [110]. Ces effets de stratifications thermiques peuvent être introduits dans l'équation de k par un nouveau terme de production (cas instable) ou de destruction (cas stable) de la turbulence selon la présence ou l'absence de mouvement engendrés par les forces d'Archimède [102].

En résolvant les corrélations croisées, les modèles de type R_{ij} permettent de prendre en compte le caractère anisotrope d'un écoulement (cf. [145] [146]) par la résolution d'une équation de transport pour chacun des flux turbulents mais il s'avère plus coûteux que les modèles modèle $k-\varepsilon$.

5.3.2.2 Simulation aux grandes échelles

Comme indiqué précédemment, la résolution de l'ensemble des échelles de temps et d'espace d'un écoulement atmosphérique s'avère impossible au regard des moyens numériques que cela nécessiterait. La résolution aux grandes échelles (LES) utilise pour alléger la résolution une décomposition des échelles basée sur l'application d'un filtre sur les équations de transport [85]. Les grandeurs physiques sont alors décomposées en une partie résolue, spatialement et temporellement par les équations de Navier Stokes, et une partie modélisée, dite de sous maille. Ce choix de décomposition s'appuie sur le constat que les grandes échelles de la turbulence sont celles qui contiennent la majeure partie de l'énergie et sont, de fait, responsables des principaux phénomènes, notamment le mélange turbulent, dans un écoulement. L'intérêt principal de ce type de décomposition est de conserver l'anisotropie de l'écoulement lorsqu'elle existe.

La précision du calcul LES dépend de la finesse du maillage, du seuil de coupure (pouvant être vu comme le seuil de résolution de la turbulence) qui doit être situé dans la zone inertielle du spectre d'énergie, la zone de transfert entre les larges et petites échelles. Ces approches nécessitent généralement des maillages plus fins que ceux requis pour les approches de type RANS. Des critères du point de vue de la consistance au niveau de la résolution de la physique sont proposés par Pope [86], tel en premier lieu de simuler 80% de l'énergie cinétique turbulente et choisir le seuil de coupure du maillage en conséquence. Dans la pratique (cf. [87][88]), la vérification des calculs LES est difficile du fait que la contribution du modèle de sous maille et que les erreurs de discrétisation numérique dépendent de la finesse du maillage.

La mise au point des conditions limites pour simuler une CLA est une étape fondamentale ([114],[114],[115]) afin d'initialiser les fluctuations turbulentes pour les simulations LES. Deux principaux types d'approches sont proposés par Tabor et al. [115]:

- une simulation est réalisée en amont du domaine (« Precursor domain ») en utilisant des conditions limites périodiques ;
- la turbulence est synthétisée par une fonction harmonique qui génère des écoulements instationnaires réalistes. Cela peut être réalisé à partir de la « Synthetic Eddy Method » (SEM) [148] qui utilise un minimum de données statistiques cohérentes ou bien de profils observés [149][148].

5.3.3 Domaine d'application

Du fait de la capacité potentielle des modèles CFD à couvrir tous les phénomènes physiques intervenant :

- au niveau du point d'émission quel que soit la nature du rejet accidentel (jet sous pression, flaque, ...)
- pour tous types d'environnement (obstacles isolés, environnement du site industriel ou urbain, topographie...)
- et quel que soit le type d'écoulement météorologique ;

le domaine d'application est plus large que les modèles gaussiens et intégraux. Toutefois dans la pratique et du fait d'une mise en œuvre parfois coûteuse (intégration de la géométrie, mise au point du maillage, coût des processeurs de calcul) il n'est pas envisageable de les utiliser dans le cadre d'une utilisation en urgence où les temps de réponses sont très courts (~ 30 min pour la mise en œuvre et l'obtention des résultats de modélisations), excepté si cela correspond à des scénarios accidentels pré définis.

La synthèse bibliographique présentée au chapitre précédent a fait ressortir principalement trois méthodes CFD pour simuler une CLA. L'approche DNS requiert la mise un point d'un maillage si conséquent en termes de nombre de points que l'utilisation de cette approche n'est pas envisageable, à la date du présent rapport, dans le cadre d'une étude d'un scénario accidentel à l'échelle d'un site industriel.

Les méthodes RANS et LES sont quant à elles adaptables à la modélisation de rejets accidentels sur un site industriel ou dans un environnement encombré.

De nombreux travaux scientifiques relatifs à des modélisations de type RANS de rejets accidentels peuvent être recensés ([116],[117],[118],[119],[120],[121],[122],[123],[124],[125]) dans la bibliographie scientifique.

Bien plus coûteuses que ces simulations de type RANS, les modélisations de l'écoulement atmosphérique par la méthode LES ([141], [128]) montrent cependant des résultats très prometteurs du point de vue des comparaisons avec des observations expérimentales en milieu encombré (cf. [142]).

5.4 Modèles de dispersion lagrangien à particules

5.4.1 Formulation

Dans un modèle de dispersion lagrangien à particules, les émissions dans l'atmosphère sont simulées à l'aide de particules fictives, représentant chacune une masse donnée de polluant. Ces particules suivent de manière passive le mouvement turbulent de la phase porteuse dans lesquelles elles sont introduites. La reconstitution de la concentration de substance émise est réalisée à partir de leur distribution spatiale à un instant donné. Le mot particule désigne ici une portion de fluide contenant la substance émise, suffisamment petite pour suivre le mouvement des plus petits tourbillons existants dans l'atmosphère. Les polluants sont simulés par ces particules fictives dont le mouvement dans un domaine tridimensionnel est défini par le vent local et dont la dispersion est obtenue par l'intermédiaire de fluctuations de vitesse aléatoires solution des équations différentielles stochastiques, qui reproduisent les caractéristiques de la turbulence atmosphérique locale.

En amont de la dispersion atmosphérique, l'écoulement porteur peut être modélisé avec un modèle d'écoulement de type CFD, tel ceux décrits au chapitre précédent. Ces modélisations sont appelées « hybrides eulériennes / lagrangiennes », les modèles CFD eulériens fournissent les champs dynamiques moyens relatifs au fluide porteur : pression, vitesse, température, turbulence. Il existe plusieurs approches pour exprimer les vitesses fluctuantes et simuler la turbulence dans un modèle lagrangien (méthode « *Simplified Langevin Mode* » (SLM) [145][143], approche de Thompson [144],...). On notera dans ce type de modélisations hybrides, l'importance d'assurer la consistance (cf. analyse détaillée dans [145]) entre l'écoulement eulérien et les modèles de turbulence du modèle lagrangien afin d'éviter des erreurs illustrées dans [145], [147].

Les modèles lagrangiens peuvent être également pilotés par un modèle de type « *Mass consistent* » appelés également modèles diagnostiques à conservation de la masse car l'écoulement est obtenu en ne résolvant qu'une seule des équations du système d'EDP (équation différentielle partielle), soit l'équation de conservation de la masse, généralement sous l'hypothèse d'un écoulement incompressible. Ces modèles produisent une interpolation sur le domaine, depuis des profils de vitesse (observations ou sorties de modèles d'écoulement) en conditions limites ou distribués dans le domaine, sous une contrainte de divergence locale nulle. Ils permettent de tenir compte de la topographie, d'une rugosité et d'une hauteur de canopée non uniformes mais également des obstacles au moyen de corrélations algébriques.

Dans les cas d'écoulement non passif, soit des dispersions de nuage à forte quantité de mouvement ou à forte densité, des modules spécifiques sont nécessaires (cf. [150]).

Les modèles lagrangiens peuvent être alimentés indirectement par des observations de terrains (par l'intermédiaire de modèles de type « *Mass consistent* » ou bien des modèles météorologiques à l'échelle régionale). Par conséquent, ils sont bien adaptés pour reconstituer l'écoulement météorologique d'un accident, ou pour reconstituer une dispersion à multi - échelle (de quelques kms à des centaines de kilomètres [6] ou bien de quelques m à quelques kilomètres [151]).

5.4.2 Domaine d'application

Les modèles LPDM peuvent être appliqués, à des cas de rejets accidentels dès lors que les écoulements à modéliser se situent dans une phase passive et cela :

- pour tous types d'environnement (obstacles isolés, environnement du site industriel ou urbain, topographie...);
- et pour tous types d'écoulement météorologique.

Les cas de rejets non passifs peuvent être traités par des modules spécifiques.

Les remarques émises pour les modèles CFD au regard de l'utilisation en situation d'urgence sont valables ici également.

5.5 Modèles Lattice-Bolzman

Contrairement à l'approche traditionnelle de la mécanique des fluides, basée sur les équations de Navier-Stokes vue au chapitre 5.3, la méthode Lattice-Bolzman consiste à discrétiser l'équation de Boltzmann (théorie cinétique des gaz) ce qui permet de modéliser de manière statistique la dynamique des particules (advection/collision) constituant le fluide soit à la fois l'air porteur et le produit toxique/inflammable. La méthode établit un lien entre la dynamique moléculaire et la modélisation macroscopique. Elle présente l'avantage d'être bien adaptée pour suivre plusieurs phases et est facile à paralléliser ce qui permet des gains intéressants en temps de calcul, notamment avec le développement des GPU. Des travaux portant sur des épandages de types accidentels de produits cryogéniques [152], d'écoulements et de pollutions atmosphériques([153], [154], [155], [156]) ont été récemment réalisés et sont prometteuses. A la date du présent rapport, les applications à des rejets accidentels sont encore peu nombreuses.

6 Modélisation de l'intermittence dans un nuage toxique/inflammable

6.1 Introduction

Les modèles présentés au chapitre précédent, permettent de calculer un champ de concentration dans le domaine d'étude considéré en fonction du temps. L'objectif final de ces études, quel que soit le cadre d'utilisation (urgence, étude réglementaire, étude de cas) est de permettre dans une étape de post traitement d'estimer les calculs d'effets toxique ou/et inflammables. Ce chapitre propose d'aller un peu plus loin sur le traitement des résultats. En effet, dans le cas des scénarios de rejets accidentels, survenant dans l'atmosphère libre, le nuage toxique se disperse dans une couche limite atmosphérique qui est turbulente. La dispersion turbulente dans l'atmosphère est le résultat d'une advection chaotique et d'un large spectre de mouvements tourbillonnaires. A un point donné, si certaines des conditions externes sont constantes comme la météorologie, la source émettrice et la topographie, en revanche, le module et de la direction du vent et la concentration tout le long de courtes périodes ne seront pas constantes. Il en découle que la couche limite atmosphérique conduit à des fluctuations de concentrations.

Hanna [94] a montré qu'un modèle peut surestimer d'un facteur 2 sur un site et sous-estimer d'un facteur 2 sur un autre site. Il interprète cette variabilité par la variabilité naturelle ou stochastique du phénomène de diffusion atmosphérique. Ainsi le pic de concentration observé durant un rejet peut varier d'un facteur 10 parmi un ensemble de rejets identiques dans les mêmes conditions atmosphériques (cf. [94]).

Afin d'estimer plus précisément la toxicité ou la gêne occasionnée par de mauvaises odeurs, la plupart des études de dispersion atmosphérique nécessiteraient d'estimer les pics de concentrations qui peuvent survenir sur un intervalle de quelques secondes durant des rejets de l'ordre de quelques minutes à une demi-heure. Du fait de l'avancée des connaissances au travers de campagnes expérimentales et du degré de sophistication des modèles de dispersion atmosphérique, des progrès sont réalisés pour mieux appréhender ce caractère intermittent. L'objectif de ce chapitre est de synthétiser les principales méthodes mathématiques.

6.2 Illustration du caractère intermittent

La Figure 22 illustre des fluctuations de concentrations observées expérimentalement où ont été représentés la concentration moyenne, qui sera désignée par \bar{C} (ou $\langle C \rangle$) et les différents niveaux de concentrations exprimés par $\bar{C} = n\sigma_C$ (noté $\bar{C} = nec$) avec $n = 1,2,3$, et σ_C l'écart type en concentration, soit la racine carrée de la variance : $\sigma_C^2 = \langle C'^2 \rangle = \langle C^2 \rangle - \langle C \rangle^2$.

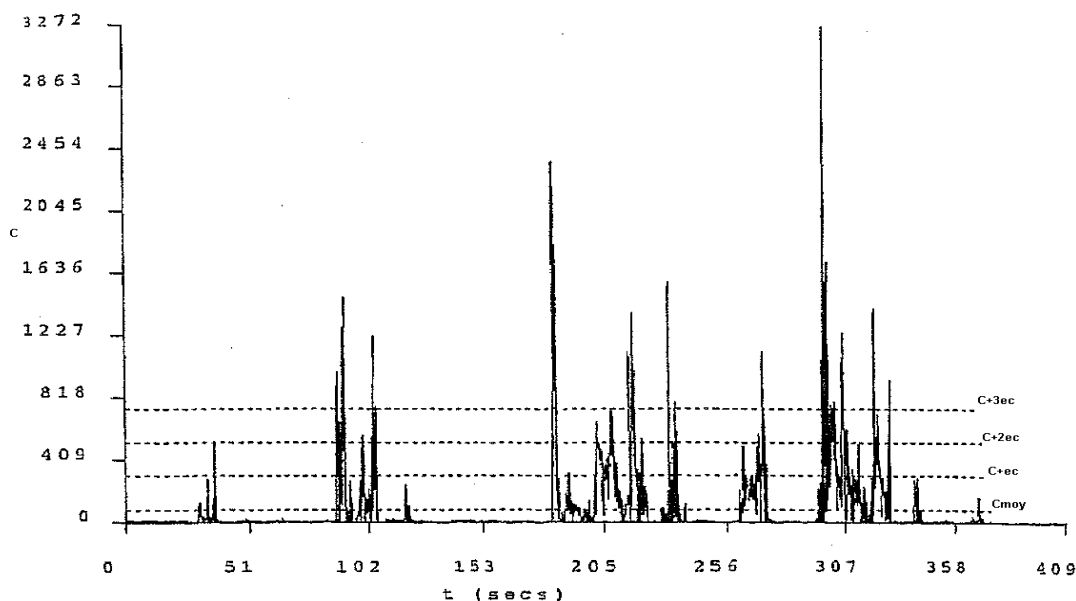


Figure 22: Série de mesures de concentration mesurées dans un panache (issue de Mylne, [127])

Cet exemple illustre de larges périodes où la concentration est nulle et des pics de concentrations élevés au regard de la concentration moyenne. Sur l'axe d'un panache au niveau du sol il n'est pas rare d'observer que $\sigma_c / \langle C \rangle$ peut atteindre 100% à 200%. En comparaison les fluctuations des composantes verticales et horizontales des vitesses sont typiquement de l'ordre de 10%.

On peut résumer ainsi les échelles de temps de la turbulence et l'impact sur les fluctuations de concentration (cf. également Annexe 2) :

- la turbulence de grande échelle a pour effet de faire varier la direction du vent autour d'une valeur moyenne. Ceci a pour effet d'induire un effet de serpentement du panache sous le vent de la source ponctuelle ;
- la turbulence de moyenne et petite échelle met en cause les tourbillons de tailles comparables à la largeur du panache ou plus petits qui vont avoir pour effet de sectionner celui-ci, et d'introduire des poches d'air de concentration nulle en son sein. Il en résulte de fortes fluctuations de concentrations.

Ces fluctuations de concentration représentent une période d'exposition non négligeable pendant laquelle les concentrations instantanées peuvent atteindre bien plus de 10 fois la valeur moyenne. Les fluctuations peuvent donc être lissées par les effets de moyennes que ce soit dans un cadre d'étude de données expérimentale ou d'interprétation de résultats de modélisations.

Quel impact sur les fluctuations des gaz toxiques ?

Afin d'illustrer l'impact possible de cet effet sur le calcul de dose toxique citons les calculs de doses toxiques réalisés par Griffiths et Megson [126] et de Mylne [127] à partir de séries de concentrations mesurées en considérant un exposant toxique n , représentatif de produits toxiques largement étudiés dans les scénarios accidentels tels que le chlore ou l'ammoniac. Ces auteurs ont estimé, sur une série de mesures expérimentales de concentrations (rejets de propylène), le rapport entre la dose toxique estimée à partir d'une intégration des points de la concentration de la série sur une courte période de temps (de 0,1 s à 100 s) par rapport à la dose déterminée à partir de la concentration C représentant la moyenne de la série sur cette même période. Cela peut s'exprimer ainsi :

$$\frac{\int_0^T C^{2,75} dt}{C_{\text{moy}}^{2,75} T}$$

Équation 7 : Rapport entre 2 calculs de dose toxique (numérateur : concentration « instantanée », dénominateur : concentration moyennée) avec :

- T qui représente au numérateur une durée d'intégration et au dénominateur la durée sur laquelle est effectuée la moyenne des concentrations ;
- C_{moy} concentration moyenne calculée sur la période T.

A ce stade du rapport, on peut introduire la notion de facteur d'intermittence I (ou $1-I$, selon les auteurs) qui représente la proportion du temps pendant lequel la concentration est « significativement » non nulle²¹. Le facteur d'intermittence permet de caractériser la variabilité d'une série. La concentration moyenne $\langle C \rangle$ et le facteur d'intermittence I sont reliés par l'équation :

$$\langle C \rangle = I \langle C \rangle_p$$

Equation 8

où $\langle C \rangle_p$ est la concentration moyenne conditionnelle (dite « à l'intérieur du panache »), calculée seulement à partir des concentrations considérées comme non nulles. Mylne a choisi des séries de concentrations (entre 50 m et 100 m de la source) sur la section transversale du panache pour lesquelles $I \approx 0,4, 0,2, \text{ et } 0,1$. Pour des périodes de moyennage faibles, soit une échelle de temps caractéristique de la respiration humaine qui est de l'ordre de 3 s, il observe que l'estimation de la toxicité s'élève relativement d'un rapport 10 à 20. Par ailleurs, Mylne observe que le rapport le plus élevé est obtenu avec $I \approx 0,1$ qui caractérise la série la plus intermittente. Cet exemple issu de la bibliographie scientifique illustre l'effet de la sous-estimation possible de la dose toxique par le calcul effectué à partir d'une concentration moyennée qui néglige les effets non linéaires dès lors que $n > 1$.

Cette illustration a seulement pour objectif de présenter l'intérêt d'appréhender l'intermittence des concentrations et les modèles mathématiques dédiés qui vont être présentés au sous-chapitre suivant. En effet, cet exemple ne peut pas être généralisé à tous les produits et à toutes les situations car rappelons que l'utilisation de la relation de dose toxique à des courtes périodes de temps n'est pas directe et valable dans tous les cas car elle simplifie l'exposition à des fluctuations de concentrations en n'incluant pas, entre autres, les limitations inhérentes au taux physiologiques d'absorption et les temps de résilience.

6.3 Formulation

Les approches les plus simples (modèles gaussiens et modèles intégraux) et recommandées dans les guides réglementaires, pour modéliser la concentration atmosphérique d'un produit toxique ne prennent pas en compte le caractère intermittent d'un panache toxique. Par ailleurs, des questions sont sans cesse soulevées sur le choix de « l'averaging time », vu pour les modèles gaussiens/intégraux (cf. sous-chapitre 5.1.3 et Annexe 2) et la dépendance forte du calcul à ce paramètre, qui vient refléter la difficulté à modéliser un large spectre de turbulence atmosphérique. L'amélioration des techniques de mesures expérimentales a permis la réalisation de campagnes d'essais in situ ([111],[113],) ou en soufflerie ([112]) et une meilleure compréhension des phénomènes de fluctuations de concentrations, leur relation avec les études spectrales de turbulence atmosphérique, la relation avec les conditions de stabilité [113] et la validation des modèles mathématiques pour calculer des fluctuations de concentration. Le principe général des méthodes mathématiques consiste à estimer les fluctuations de concentrations en prédisant la variance de concentration et la concentration moyenne. Ces statistiques sont utilisées via une fonction de densité de probabilité (d'occurrence) ou en anglais "*Probability Density Function*" (PDF) qui permet de déterminer la fraction du temps pour laquelle des niveaux spécifiques sont dépassés durant le rejet

Il est important de garder à l'esprit que les modèles de fluctuations ne permettent pas de prédire le comportement d'un rejet en particulier, mais la fraction d'un ensemble important d'événements répétés (cf. Annexe 2) qui vont mener par exemple au dépassement d'une concentration limite. Il faut rappeler également que la plupart des modèles ont été élaborés pour une source ponctuelle et l'extension aux sources plus diffuses (surfacique, linéique, volumique) n'est pas évidente.

²¹ Cette définition doit être regardée sous le sens de la physique plutôt que mathématique car la plupart du temps on choisit une valeur seuil afin de permettre la distinction entre les bruits de fond inhérents à l'appareil de mesure, la pollution de fond et la présence du traceur.

On peut distinguer les catégories (liste non exhaustive) des modèles de fluctuations suivants :

- 1) les modèles de panache gaussiens [128] qui utilisent des profils de concentration moyenne et diagnostique les autres moments de la concentration ($\overline{c(x,t)c(x,t)}, \dots$) afin d'estimer les intensités de fluctuations,
- 2) les modèles eulériens CFD (basés sur un module d'énergie cinétique turbulente de type k- ϵ) qui comportent une équation supplémentaire pour calculer la variance de concentration [129],
- 3) les modèles lagrangiens stochastiques [133] à particules qui simulent les fluctuations par le suivi de milliers de particules. Ces modèles intègrent les approches Sawford [134] et Thomson [135] afin d'effectuer des calculs statistiques et d'estimer la moyenne et la variance de la concentration. Une distribution d'une fonction de densité de probabilité est supposée à priori pour estimer les valeurs de pics,
- 4) les approches où l'écoulement est simulé par CFD de type LES ([130],[131],[132]). La LES permet d'accéder directement au champ turbulent tridimensionnel, de calculer la variance de concentration et permet d'estimer une densité de probabilité de concentration.

De manière générale les résultats de ces modèles sur le calcul de dose peuvent parfois dépendre du temps d'intégration des fluctuations choisie par l'utilisateur. On signalera alors les travaux Bartzis et al. [136] sur des cas de rejets expérimentaux d'ammoniac (essais FLADIS,) où est proposé un modèle simple d'estimation des doses toxiques maximales, par corrélation entre la concentration moyenne et l'échelle de temps intégrale turbulente. Cette option paraît prometteuse car le calcul d'un niveau de dose maximal instantané est « moins » dépendant du temps d'exposition choisi et ouvre des perspectives intéressantes à l'utilisation des modèles plus complexes.

De par leur complexité et le manque de consensus [137], les modèles mathématiques destinés à la prise en compte des fluctuations de concentrations ne sont pas encore recommandés par les guides réglementaires. A cela s'ajoute le fait que les seuils toxiques utilisés actuellement sont basés sur des expositions expérimentales à concentration constante (sur l'animal), il existe peu de travaux expérimentaux [138] sur l'étude de l'évolution des seuils (doses) réalisés avec des expositions à des concentrations fluctuantes. Le recours à des modèles de la réponse physiologique du corps humain complexe pourrait à terme [139] sans doute combler ses lacunes.

7 Comment évaluer des modèles de dispersion atmosphérique ?

7.1 Historique des protocoles d'évaluations et d'harmonisation des modélisations

La théorie d'évaluation des modèles de dispersion atmosphérique a été initialement développée pour les modèles de type gaussien à vocation réglementaire. En effet, la surveillance de l'impact des concentrations dans les panaches industriels de polluants émis par les cheminées d'usines, a constitué dès le début des années 60 un champ d'application pour la modélisation numérique. C'est à cette époque qu'ont été développés les premiers modèles de type gaussien. La prise de décisions réglementaires sur la base des résultats fournis par ces outils a mis en évidence dans les années 1980 la nécessité de s'assurer de leur pertinence et d'estimer l'erreur d'approximation. Les initiatives de l'U.S. EPA (U.S. Environmental Protection Agency) et de l'AMS (American Meteorological Society) visant à définir une stratégie d'évaluation se sont initialement focalisées sur cette problématique.

En 1993, Hanna [171] pose la question suivante : "*Hazardous Gas Model Evaluations. Is an Equitable Comparison Possible?*". C'est ainsi que ses travaux ont contribué à la réflexion sur la mise au point d'un protocole scientifique afin de comparer de manière équitable les modèles de dispersion atmosphérique destinés à étudier les scénarios des risques accidentels. Par la suite, les travaux présentés dans Hanna et al. [172] ont constitué le premier exercice de grande ampleur d'évaluation de modèles de dispersion atmosphérique de gaz dangereux. Cet exercice, largement référencé dans la littérature, a été effectué sur la base de données expérimentales et sur une approche statistique. Il résulte de cette démarche un protocole pour évaluer les modèles vis-à-vis des données expérimentales mais également pour les comparer. A titre d'information, le lecteur peut se rapporter à l'annexe 3 qui donne les principaux kits expérimentaux utilisés dans les travaux d'évaluation des rejets accidentels atmosphériques.

Durant les années 1990, cette évolution sur l'évaluation des modèles fut fortement souhaitée en Europe également [173], ce qui a donné lieu à des premiers travaux de tests sur les protocoles d'évaluation [174]. Ensuite, certains des projets de recherche se sont focalisés sur des thèmes plus précis tels que la thématique des gaz denses avec le projet "*Scientific Model Evaluation Techniques Applied to Dense gas Dispersion Models in Complex Situations*" (SMEDIS, 2001) dont les résultats ont été consignés dans [9].

Dans le cadre du projet européen "QNET-CFD"[176], destiné à la mise au point d'une base de données pour l'évaluation des codes CFD, une revue synthétique et une analyse sont proposées sur l'historique des évaluations. On peut retenir :

- la nécessité d'identifier pour une évaluation donnée quelles vont être les sorties du modèle qui vont être évaluées, soit uniquement la concentration, mais cela peut être aussi la dose (intégration de la concentration dans le temps) ;
- l'accent mis sur le manque de protocole de quantification d'évaluation des modèles CFD sur les études environnementales des écoulements atmosphériques et des écoulements étudiés dans l'ingénierie en général.

Les critères d'acceptation développés initialement pour l'ensemble des modèles de la qualité de l'air ont été décrits et commentés en détail dans la publication de Hanna et Chang [175], il ressort qu'ils sont depuis lors utilisés également pour des évaluations sur divers cas expérimentaux (échelle réelle ou soufflerie) ayant pour objectifs des rejets de type accidentels ([128], [178]).

7.2 Comparaisons modèles / expérimentations : quelques illustrations

Dans la littérature il peut être recensé un grand nombre de comparaisons modèles / expérimentations portant sur des modèles de dispersion atmosphérique de tous types. A titre d'illustration, ce sous-chapitre présente un résumé des 2 évaluations et comparaisons de modèles du risque accidentel parmi les plus exhaustives quant à la nature des modèles. Ces comparaisons ont été effectuées par :

- Hanna et al. (1993) [94] : "*Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations*", Atmospheric Environment, (Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993);
- Carissimo et al. (2001) [95] : "*The SMEDIS database and validation exercise*". (Int. J. Environnement and Pollution, Vol. 16, Nos. 1-6, p 614-629, 2001).

Les travaux de Hanna et al. (1993) [58] ont consisté à évaluer des modèles de type intégral pour la très grande majorité et quelques modèles analytiques, plus particulièrement adaptés à la dispersion des gaz denses, sur des terrains plats et non encombrés. L'évaluation a été réalisée au moyen de 8 jeux de données expérimentales. Les auteurs classent ces données en 3 catégories : les rejets passifs (campagnes expérimentales : Prairie Grass, Hanford), les rejets continus de gaz denses (campagnes expérimentales : Burro LNG, Coyote LNG, Desert Tortoise NH₃-gaz et aérosol, Goldfish HF- gaz et aérosol, Maplin Sands-LNG, Thorney Island), et les rejets instantanés de gaz denses (campagnes expérimentales : Thorney Island-freon). Hanna exprime la performance des modèles au moyen du biais et de la moyenne géométriques. Beaucoup de conclusions et d'enseignements ont été émis à partir de ces travaux, seules quelques-unes des conclusions sont reportées ici.

Les modèles sont assez performants pour les rejets passifs et diffèrent peu entre eux. Les modèles de gaz lourds ont tendance à surestimer la largeur du panache alors que dans le même temps ils sous-estiment sa hauteur par un facteur 2. Les auteurs montrent la variabilité des performances des modèles suivant les sites, et pour des rejets de diverses natures. Ainsi un modèle peut surestimer d'un facteur 2 sur un site et sous-estimer d'un facteur 2 sur un autre site. Ils interprètent cette variabilité par la variabilité naturelle ou stochastique du phénomène de diffusion atmosphérique.

Le projet Européen SMEDIS [177] a permis l'évaluation de modèles de gaz lourds dans le cas de situations où interviennent des effets complexes tels les aérosols, la topographie et les obstacles. Des modèles de différentes natures ont été évalués, ils sont donnés ici suivant leur complexité croissante : modèles de type abaqes, *shallow-layer*, modèles intégraux, modèles CFD.

Chacun de ces modèles a été soumis aux 4 catégories de configurations : pas d'effets particuliers, présence d'obstacles, présence d'aérosols, terrain complexe. Seuls les modèles CFD ont été évalués sur des configurations complexes (obstacles, ...). En revanche, ils n'ont pas été comparés aux essais expérimentaux sans effets particuliers, en l'occurrence les essais rejets gazeux de Prairie Grass. Les modèles de type abaqes n'ont pas été évalués sur les cas de terrains complexes.

De manière très synthétique, on peut retenir des résultats obtenus que :

- l'ensemble des modèles fournit de meilleurs résultats dans la prédiction des maximums de concentration plutôt que dans la forme du nuage ;
- sur la base de la variance et de l'écart type de la moyenne géométrique²², les modèles intégraux globalement apparaissent les plus performants exceptés pour les effets de terrain ;
- sur la base de ces 2 indicateurs statistiques, les résultats montrent une amélioration des performances avec la complexité du modèle excepté pour les modèles shallow-layer.

Les auteurs rappellent qu'il existe bien souvent des limitations au niveau du jeu de données, dont les principales sont reportées ci-dessous :

- il y a peu de données expérimentales portant sur des rejets en présence d'aérosols ;
- il y a peu de données en conditions atmosphériques stables ;
- les informations sur les précisions des capteurs et l'incertitude des données ne sont pas toujours disponibles.

7.3 Analyse critique sur les évaluations de modèles et nouveau protocole

Les auteurs des exercices d'évaluation présentés au chapitre précédent rappellent qu'il existe un bon nombre d'incertitudes sur les observations expérimentales au niveau :

- des données météorologiques ;

²² la variance et la moyenne géométrique s'appuient sur le logarithme des concentrations plutôt que sur leurs valeurs brutes. Ces indicateurs sont recommandés dans (Hanna, 1991) lorsque les grandeurs étudiées s'étendent sur une large plage de valeurs.

- des données de concentrations (temps de réponse caractéristique des détecteurs et temps sur lesquels elles sont moyennées).

Ils soulignent les difficultés logistiques habituellement rencontrées lors des essais :

- l'insuffisance du nombre de capteurs afin de mesurer le maximum de concentration à des distances en aval du rejet ;
- les positions verticales des capteurs qui parfois ne sont pas reportées or elles jouent un rôle crucial dès lors qu'il s'agit de simuler les rejets de gaz lourds.

Du fait que les expérimentations à grande échelle sont coûteuses, il est difficile d'effectuer des mesures pour toutes les conditions météorologiques, et globalement on peut dire qu'il y a peu de données pour des conditions de fortes stabilités et de vent faible. Dans ce domaine d'expérimentations, la plupart des campagnes expérimentales qui ont été effectués concernent des mesures de concentrations plutôt de l'ordre du pourcentage (> 1000 ppm) et peu de mesures existent sur une gamme complète des seuils de toxicité aiguë étudiés dans les études réglementaires (pour les plus toxiques : de dizaine de ppm à centaines de ppm).

Ainsi à titre d'exemple (cf. Annexe 3), les gammes de concentrations mesurées sont :

- pour Desert Tortoise, de l'ordre quelques dizaines de milliers de ppm, et il y a eu des mesures de concentrations de l'ordre de quelques centaines de ppm réalisées par un capteur portable à des distances éloignées de la source (~ 3 km) ;
- pour FLADIS, de l'ordre de quelques milliers à quelques centaines de ppm ;
- pour Goldfish, de l'ordre de quelques dizaines de milliers de ppm à quelques centaines de ppm ;
- pour Burro, de l'ordre de quelques centaines de milliers de ppm à quelques milliers de ppm ;
- pour Thorney Island, de quelques dizaines de milliers de ppm à quelques milliers de ppm ;
- pour MUST, de quelques milliers de ppm à quelques ppm ;
- pour la campagne INERIS, de quelques dizaines de milliers de ppm à quelques centaines de ppm ;
- pour Jack Rabbit, de quelques milliers de ppm à quelques ppm.

Il apparaît clairement qu'il y a très peu de campagnes, du type de celle de Prairie Grass qui avait permis de mesurer des concentrations allant de l'ordre du ppm (jusqu'à 800 m) à quelques centaines de ppm dans le champ proche. Au niveau de l'échelle spatiale, du fait du manque de données sur des rejets catastrophiques, autres que des données issues des campagnes expérimentales idéalisées, l'évaluation des modèles demeure limitée à la micro-échelle (quelques kms) [179][49].

Les observations du récent projet Jack Rabbit [180] viennent combler certaines lacunes et apporter des données expérimentales sur des cas de rejets à une échelle représentative d'une échelle industrielles de produits très toxiques sur des distances élevées (~11 km) où la variation spatiale et temporelle de l'écoulement porteur peut être importante.

Le présent rapport a fait apparaître une multitude croissante des familles de modèles dédiés à la dispersion atmosphérique de rejets accidentels et la complexité à cibler des données fiables d'évaluation représentatives de scénarios accidentels. Pour surmonter ces difficultés, le projet SAPHEDRA²³ propose un protocole d'évaluation normalisé pour les modèle traditionnels et les modèles récents.

²³ <https://projects.safera.eu/project/14>

8 Conclusion et domaine d'application des modèles

Dans l'environnement industriel les dispersions de produits toxiques ou inflammables peuvent survenir suite à des émissions à l'atmosphère, non désirées, telles la fuite d'une cuve, la rupture de canalisation ou un dégagement de fumées d'incendie. La connaissance des mécanismes de dispersion atmosphérique issus de situations accidentelles sont nécessaires dans le cadre de support technique en situation d'urgence, dans le cadre de la réalisation d'une étude des dangers ou de l'analyse d'un accident.

Ce document présente les phénomènes physiques de la dispersion atmosphérique de gaz toxique ou inflammable ainsi que les familles de modèles visant à les représenter et en estimer les effets.

Les principaux facteurs influençant la dispersion atmosphérique sont :

- les conditions de rejet, qui dépendent fortement de l'état initial du produit (gaz sous pression ou non, gaz liquéfié, ...). Elles permettent de caractériser le terme source, qui est un paramètre fondamental (cf. document « $\Omega-19$ »), mais aussi le comportement du nuage accidentel dans le champ plus lointain ;
- l'environnement dans lequel se disperse le nuage : l'occupation du sol, les obstacles (bâtiments industriels, lotissements...), le relief naturel ;
- Et les conditions météorologiques et l'écoulement atmosphérique près du sol influencé prioritairement par le vent et l'état de stabilité de l'atmosphère (forte stabilité, instabilité, ...).

La dispersion atmosphérique est une résultante de la combinaison de ces facteurs et phénomènes physiques qui sont fortement interreliés. Une large gamme de famille des modèles numériques de dispersion atmosphérique adaptés aux rejets accidentels existe et une synthèse descriptive théorique a été présentée dans ce rapport. Tous les modèles ne comportent pas le même champ d'application. Alors que les modèles plus simples (type intégraux ou gaussiens) utilisent un système d'équations simplifiés ce qui conduit à une résolution rapide et à des temps de calculs beaucoup plus courts ; leur application sera limitée à des environnements non encombrés. Par ailleurs, ces derniers comportent des paramètres de diffusion turbulente plus directement calés sur des essais expérimentaux en champ libre.

Les formulations théoriques des familles de modèles (CFD eulérien, LPDM) permettant de prendre en compte la présence d'obstacles ou de topographie au moyen d'un maillage spatial et de simuler les écoulements inhérents à ces environnements complexes ont été présentées.

Les guides de bonnes pratiques relatifs à chacun des familles modèles s'ils existent sont référencés.

Une analyse critique de l'évaluation des modèles et une revue des protocoles d'évaluations dans le cadre de scénarios accidentels a été réalisée.

Une synthèse des domaines d'applications pour chacune des familles de modèles est présentée dans le tableau qui suit.

Familles de modèles				
	Gaussien	Intégral	Computational Fluid Dynamics	Lagrangian Particles Dispersion
Contexte d'utilisation				
Urgence	✓	✓	✓	✓
Etude réglementaire	✗	✓	✓	✓
Etude de cas (accidents)	✗	✓	✓	✓
Nature de la substance /réactivité chimique				
Réactivité chimique avec l'air / humidité ambiante	✓ si module chimique (cf. 4.3.1)			
Polymérisation	✓ si module chimique spécifique (cf. 4.3.1)			
Type de rejet				
Dispersion au-dessus d'une flaque – faible vitesse	✓			
Jet gazeux sous pression	✗	✓	✓	✓ (si module)
Rejet à forte quantité de	✗	✓	✓	✓ (si module)
Libération d'un nuage à masse volumique élevée	✗	✓	✓	✓ (si module)
Gaz léger	✗	✓	✓	✓ (si module)
Rejet bi-phasique	✗	✓		✓
Environnement du rejet				
Non encombré	✓	✓	✓	✓
Obstacles	✗	✗	✓	✓
Topographie	✗	✗	✓	✓
Définition des entrées pour les conditions météorologiques				
Définition des conditions météorologiques simplifiées (définition classes de Pasquill)	✓	✓	✓	✓
Champ météorologique 4D	✗	✗	✓	✓

Tableau 4 : contexte d'utilisation des familles de modèles (urgence, étude réglementaire (EDD), études d'accidents passés), domaine d'application des familles de modèles selon le type de rejet, l'environnement du rejet atmosphérique et la définition des conditions météorologiques

9 Références

- [1] Havens, Jerry, Heather Walker, and Tom Spicer. "Bhopal Atmospheric Dispersion Revisited." *Journal of Hazardous Materials* 233 (2012): 33–40.
- [2] The Buncefield Investigation Progress report. Buncefield Investigation Manager and Member of Buncefield Major Incident Investigation Board.
- [3] Railroad Accident Report NTSB/RAR-71/2.
- [4] U.S. Chemical safety and hazard investigation board, investigation report DPC enterprises, L.P. FESTUS, MISSOURI, AUGUST 14, 2002.
- [5] Hanna, Steven, Seshu Dharmavaram, John Zhang, Ian Sykes, Henk Witlox, Shah Khajehnajafi, and Kay Koslan. "Comparison of Six Widely-Used Dense Gas Dispersion Models for Three Recent Chlorine Railcar Accidents." *Process Safety Progress* 27, no. 3 (2008): 248–59.
- [6] F. Tognet, M. Durif, F. Meleux, L. Letinois, E. Boulvert, M. Ramel, P. Bodu, A. Colette, B. Bessagnet, L. Rouil From Paris to London, post accidental dispersion. From Paris to London, post accidental dispersion modelling of a single point source release.
- [7] Wilson, D C. « Flixborough versus Seveso - Comparing the Hazards », no 58 (s. d.): 16.
- [8] O. Björnham, H. Grahn, P. von Schoenberg, B. Liljedahl, A. Waleij, et N. Brännström, « The 2016 Al-Mishraq sulphur plant fire: Source and health risk area estimation », *Atmospheric Environment*, vol. 169, p. 287-296, nov. 2017, doi: 10.1016/j.atmosenv.2017.09.025.
- [9] S. A. Carn, « Fire at Iraqi sulfur plant emits SO₂ clouds detected by Earth Probe TOMS », *Geophysical Research Letters*, vol. 31, n° 19, 2004, doi: 10.1029/2004GL020719.
- [10] Cavallaro, A., G. Tebaldi, et R. Gualdi. « Analysis of Transport and Ground Deposition of the TCDD Emitted on 10 July 1976 from the ICMESA Factory (Seveso, Italy) ». *Atmospheric Environment* (1967) 16, no 4 (janvier 1982): 731-40. [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(82\)90390-0](https://doi.org/10.1016/0004-6981(82)90390-0).
- [11] Batterman, Stuart A., Eugene Cairncross, et Yu-Li Huang. « Estimation and Evaluation of Exposures from a Large Sulfur Fire in South Africa ». *Environmental Research* 81, no 4 (Novembre 1999): 316-33. <https://doi.org/10.1006/enrs.1999.3990>.
- [12] INERIS - rapport OMEGA 19 (2006). Détermination des grandeurs caractéristiques du terme source nécessaires à l'utilisation d'un modèle de dispersion atmosphérique des rejets accidentels. Rapport d'étude 26/10/2006 N° DRA-2005-P46055-C51076.
- [13] OMEGA 16 - Toxicité et dispersion des fumées d'incendie : Phénoménologie et modélisation des effets. Rapport d'étude INERIS – DRA – N° 46055-CL57149.
- [14] INERIS - rapport OMEGA 15 (2013). Les éclatements de capacités, phénoménologie et modélisation des effets. Rapport d'étude 17/10/2013 N° DRA-12-125630-04945B.
- [15] R. Bouet, S. Duplantier, and O. Salvi, 'Ammonia large scale atmospheric dispersion experiments in industrial configurations', *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 18, no. 4–6, pp. 512–519, Jul. 2005, doi: 10.1016/j.jlp.2005.07.016.
- [16] U.I.C. (1995), « Cahier n°6 : Dispersion atmosphérique ». Juin 1995, Edition Chimie Promotion.
- [17] Turbelin G. (2000). « Modélisation de la turbulence atmosphérique en vue de l'étude du chargement aérodynamique des structures soumises aux effets du vent ». Thèse soutenue le 14 janvier 2000 à l'Université d'Evry – Centre d'Etudes de Mécanique d'Ile-de-France.
- [18] Crabol et. al. (1999). « Modèle franco-allemand pour le calcul de la dispersion atmosphérique en cas d'accident nucléaire ». Note technique IPSN/DPEA/SEAC/99-077. Note technique IPSN/DPEA/SECRI/99-128.
- [19] Hunt J.C.R. (1992). « Developments in computational modelling of turbulent flows ». Pironeau et al. - Cambridge University Press.
- [20] Van der Hoven I. (1957). Power Spectrum of Horizontal Wind Speed in the Frequency Range from 0,0007 to 900 cycles per Hour. *Journal of Meteorology* 14(1957), pp 160-164.
- [21] HSE, 2001. Atkinson Effects of secondary containment on source term modelling. Contract research report 324/2001.
- [22] M. E. Davies and S. Singh, 'The phase II trials: A data set on the effect of obstructions', *Journal of Hazardous Materials*, vol. 11, pp. 301–323, Jan. 1985, doi: 10.1016/0304-3894(85)85043-3.
- [23] Atkinson B.W. (1995). « Introduction to the fluid mechanics of meso-scale flow fields ». ERCOFTAC Series – Kluwer Academic Publishers.
- [24] Britter & Mcquaid, 1988. Workbook on the dispersion of dense gases. HSE contract research report n0 17/1988.
- [25] Hug M. (1975). « Mécanique des fluides appliquée aux problèmes d'aménagement et d'énergétique ». Edition Eyrolles.
- [26] E. Yee and C. A. Biltoft, 'Concentration Fluctuation Measurements in a Plume Dispersing Through

- a Regular Array of Obstacles', *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 111, no. 3, pp. 363–415, Jun. 2004, doi: 10.1023.
- [27] M. J. Davidson et al., 'Plume dispersion through large groups of obstacles—A field investigation', *Atmospheric Environment*, vol. 29, no. 22, pp. 3245–3256, Nov. 1995, doi: 10.1016/1352-2310(95)00254-V.
- [28] R. W. MacDonald, R. F. Griffiths, and S. C. Cheah, 'Field experiments of dispersion through regular arrays of cubic structures', *Atmospheric Environment*, vol. 31, no. 6, pp. 783–795, Mar. 1997, doi: 10.1016/S1352-2310(96)00263-4.
- [29] J. Cai et al., 'Investigation into the effect of upstream obstacles and hazardous sources on dispersion in the urban environment with LES model', *Journal of Hazardous Materials*, vol. 390, p. 121953, May 2020, doi: 10.1016/j.jhazmat.2019.121953.
- [30] Jean-Marc Lacombe, Guillaume Leroy, Benjamin Truchot, Lauris Joubert, Xiao Wei, Eric Dupont, Eric Gilbert, Bertrand Carissimo. Large-eddy simulation of wind flows and comparisons with very-near field campaign data. 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO 16), Varna (Bulgarie), 2014.
- [31] Proust C. (1999). « Mécanismes de dispersion et d'explosion lors de fuites d'hydrogène liquide ». Rapport INERIS référencé INERIS – DRA –CPr – Mars 2000 – 11AP50 – CGR 20393.
- [32] Mylne K.R. Concentration fluctuation measurements in a plume dispersing in a stable surface layer. *Boundary-Layer Meteorology* 60: 15-48, 1992.
- [33] Davies & Sinh, 1985. The phase ii trials: a data set on the effect of obstructions. *Journal of Hazardous Materials*, vol 11, pp. 301-323.
- [34] Bakkum et. al. (1997). « Methods for the calculation of physical affects: Vapour cloud dispersion ». TNO - Yellow Book – CPR 14E – 3e edition 1997.
- [35] Shannon Fox, Project Jack Rabbit - Chlorine Chemical Reactions as a Loss Mechanism for Dense Plumes. Presented to: Chlorine Institute Technical Symposium Houston, TX, April 8, 2013.
- [36] J. D. Hearn, R. Weber, R. Nichols, M. V. Henley, et S. Fox, « Deposition of Cl₂ on soils during outdoor releases », *Journal of Hazardous Materials*, vol. 252-253, p. 107-114, mai 2013.
- [37] Guinnup , Dave . " Non - buoyant Puff and Plume Dispersion Modeling Issues . " *Plant / Operations Progress* , January 1992, pp. 12-5.
- [38] Hanna S.R. et. al. (1982a). « Guidelines for use of vapor cloud dispersion models ». Technical Information Center. U.S. Department of Energy.
- [39] Witlox H.W.M. (2000). « PHAST 6.0 - Unified Dispersion Model - Consequence Modelling Documentation » DNV.
- [40] T. Kapias et R. F. Griffiths, « A model for spills of SO₃ and oleum Part I. Model description », p. 29, 1998.
- [41] T. Kapias et R. F. Griffiths, « A model for spills of SO₃ and oleum Part II. Results, conclusions and discussion », p. 12, 1998.
- [42] T. Kapias et R. F. Griffiths, « Dispersion and thermodynamics of clouds generated from spills of SO₃ and oleum », *Journal of Hazardous Materials*, vol. 67, n° 1, p. 9-40, mai 1999, doi: 10.1016/S0304-3894(99)00015-1.
- [43] Stull, Roland B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*.
- [44] Delmas R., Gérard M. et Peuch V.H. (2005). *Physique et chimie de l'atmosphère*. Édition Belin, Paris.
- [45] Pasquill, F. (1961). « The estimation of the dispersion of windborne material ». *Meteor. Mag.*, 90, 33–49.
- [46] Hanna S.R. et. al. (1982b). « Handbook on atmospheric diffusion ». Technical Information Center. U.S. Department of Energy.
- [47] Lees F. P. « Loss prevention in the process industries ». Chap. 15 : Emission et dispersion - Volume 1 – 2ème édition.
- [48] Wieringa J.; (1993). Representative roughness parameters for homogeneous terrain. *Boundary-Layer Meteorology*, Vol 63, pp. 323-363.
- [49] Britter, R.E. Recent research on the dispersion of hazardous materials. Industrial safety environment and climate programme. EUR 18198 EN, 1998.
- [50] Turner D. B. (1970). « Workbook of atmospheric dispersion estimates ». Public Health Service Publication n°999-Ap-26.
- [51] Barad, M. L. (Ed.), 1958, Project prairie Grass: A Field Program in Diffusion, Geophysical Research Papers, No. 59, Vols I and II, report AFRC-TR-58-235, Air Force Cambridge Research Center.
- [52] Pasquill, F., 1961: The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteor. Mag.*, 90, 33–49.

- [53] Gifford, F. A., Jr., 1961: Use of routine observations for estimating atmospheric dispersion. *Nucl. Saf.*, 2, 47–57.
- [54] Gifford, F. A.: 1968, An Outline of Theories of Diffusion in the Lower Layers of the Atmosphere, in D. H. Slade (ed.), *Meteorology and Atomic Energy*, U.S. Atomic Energy Commission, National Technical Information Service, Springfield, VA.
- [55] Gifford, F. A., Jr., 1976: Turbulent diffusion-typing schemes: A review. *Nucl. Saf.*, 17, 68–86.
- [56] Doury, « Vade-mecum des transferts atmosphériques ». Rapport DSN n°440.
- [57] Turner D. B. (1970). « Workbook of atmospheric dispersion estimates ». Public Health Service Publication n°999-Ap-26.
- [58] A. Venkatram, 'The role of meteorological inputs in estimating dispersion from surface releases', *Atmospheric Environment*, vol. 38, no. 16, pp. 2439–2446, May 2004, doi: 10.1016/j.atmosenv.2004.02.005.
- [59] Wilson DJ (1995) Concentration fluctuations and averaging time in vapor clouds. Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, New York, NY.
- [60] Briggs, G. A. (1973). « Diffusion Estimation for Small Emissions ». ATDL Contribution File No. 79. Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory.
- [61] Jacquet J. (1975), "Mécanique des Fluides et Environnement", Mécanique des Fluides Appliquée, Eyrolles. Chap. XIV.
- [62] J. H. Seinfeld and S. N. Pandis, *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, John Wiley & Sons, New York, 1998.
- [63] Turner D. B. (1997). The Long Lifetime of the Dispersion Methods of Pasquill in U.S. Regulatory Air Modeling. *Journal of applied meteorology*. Volume 36, p 1016.
- [64] Bakkum et. al. (1997). « Methods for the calculation of physical affects: Vapour cloud dispersion ». TNO - Yellow Book – CPR 14E – 3e edition 1997.
- [65] Nieuwstadt, F.T.M., van Ulden, A.P., 1978. A numerical study of the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmos. Environ.* 14, 267–269. doi:10.1016/0004-6981(80)90288-7.
- [66] Mylne K.R., 1988. Experimental measurements of concentration fluctuations. Pp. 555-565 in *Air pollution modelling and its Application VII*, ed. Han van Dop, Plenum Press, New York.
- [67] Mylne K.R.. Concentration fluctuation measurements in a plume dispersing in a stable surface layer. *Boundary-Layer Meteorology* 60: 15-48, 1992.
- [68] M. J. Ivings, C. J. Lea, D. M. Webber, S. F. Jagger, et S. Coldrick, « A protocol for the evaluation of LNG vapour dispersion models », *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 26, n° 1, p. 153-163, janv. 2013.
- [69] *Guideline for use of vapor Cloud Dispersion Models*, 2nd E. New York :American Institute of Chemical Engineers. 1996.
- [70] Bonnes pratiques pour l'utilisation des seuils de toxicité aiguë par inhalation dans le cadre des études réglementaires' et référencé INERIS-DRA-10-109949-12423A
- [71] Witlox H.W.M. (2000). « PHAST 6.0 - Unified Dispersion Model - Consequence Modelling Documentation »
- [72] DNV Carruthers DJ1, Seaton MD, McHugh CA, Sheng X, Solazzo E, Vanvyve E. Comparison of the complex terrain algorithms incorporated into two commonly used local-scale air pollution dispersion models (ADMS and AERMOD) using a hybrid model. *J Air Waste Manag Assoc.* 2011 Nov;61(11):1227-35.
- [73] Meïssam Bahlali : Adaptation de la modélisation hybride eulérienne/lagrangienne stochastique de Code_Saturne à la dispersion atmosphérique de polluants à l'échelle micro-météorologique et comparaison à la méthode eulérienne. Thèse de doctorat. [19/10/2018](#).
- [74] Hankin R., Major hazard risk assesment over non-flat terrain. Part I : continuous releases. *Atmospheric Environment* 38 (2004) 695-705.
- [75] Hankin, R.K.S. and Britter, R.E. (1999) TWODEE: The Health and Safety Executive's shallow layer model for heavy gas dispersion. Part 1: Mathematical basis and physical assumptions. *Journal of Hazardous Materials*, 66 (3). pp. 211-226.
- [76] Marcel Lesieur, *Turbulence*, EDP Sciences, 2013 (ISBN 2-759-81018-6).
- [77] M. Farge, « EVOLUTION DES THEORIES DE LA TURBULENCE DEVELOPEE », p. 23.
- [78] P. Chassaing, « N7_3A Modélisation de la turbulence - Leçon 2 »:, p. 27.
- [79] Candel. *Cours de mécanique des fluides* . 2ème édition - Éditeur Dunod. 2002.
- [80] T. Poinsot. *Theoretical and numerical combustion*. Authors: T. Poinsot and D. Veynante. (2011, Third Edition).
- [81] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows, volume I : fundamentals of numerical discretization*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1986.

- [82] J. Luo, Z. Lu, et Y. Liu, « Simulation of Lagrangian Dispersion Using a Lagrangian Stochastic Model and DNS in a Turbulent Channel Flow », *Journal of Hydrodynamics*, vol. 21, n° 6, p. 767-773, déc. 2009.
- [83] R. N. Raouf, L. Koithara, S. Costil, et C. Langlade, « Turbulences of the supersonic gas flow during cold spraying and their negative effects: A DNS CFD analysis coupled with experimental observation and laser impulse high-speed shadowgraphs of the particles in-flight flow », *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 147, p. 118894, févr. 2020.
- [84] Mijan Mohammadi & Olivier Pironneau. Analysis of the k-epsilon turbulence model. <https://www.ljll.math.upmc.fr/pironneau/publi/publications/bookBMOPke.pdf>.
- [85] Sagaut. Large Eddy simulation for incompressible flows. 2010.
- [86] S. B. Pope, « Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows », *New Journal of Physics*, vol. 6, p. 35-35, mars 2004, doi: 10.1088/1367-2630/6/1/035.
- [87] B. Celik, Z. N. Cehreli, and I. Yavuz. Index of resolution quality for large eddy simulations. *J. Fluids Eng.*, 127:949–958, 2005.
- [88] S. E. Gant, « Practical Quality Measures for Large-Eddy Simulation », in *Direct and Large-Eddy Simulation VII*, vol. 13, V. Armenio, B. Geurts, et J. Fröhlich, Éd. Dordrecht: Springer Netherlands, 2010, p. 217-222..
- [89] Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail National. https://aida.ineris.fr/sites/default/files/gesdoc/86009/Guide_Bonnes_Pratiques.pdf.
- [90] J.M. Lacomme. B. Truchot. « Harmonisation of practices for atmospheric dispersion modelling within the framework of risk assessment » 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO 15), Madrid (Espagne).
- [91] A.G. Venetsanos, J.G. Bartzis, J. Würtz, D.D. Papailiou. DISPLAY-2: a two-dimensional shallow layer model for dense gas dispersion including complex features. *Journal of Hazardous Materials A99* (2003) 111–144.
- [92] Olivier Pironneau, Bijan Mohammadi. Analysis of the k-epsilon turbulence model – 1 février 1994.
- [93] Ivings, M. J., Lea, C. J., Webber, D. M., Jagger, S. F., and Coldrick, S., (2012). A protocol for the evaluation of LNG vapour dispersion models, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 26, no. 1, pp. 153–163.
- [94] Hanna, Chang and Strimaitis. "Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations", *Atmospheric Environment*, Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993.
- [95] Carissimo B., Jagger S.F., Daish N.C., Halford A., Selmer-Olesen S., Riikonen K., Perroux J;M., Würtz J. The SMEDIS database and validation exercise. *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 16, Nos. 1-6, p 614-629, 2001.
- [96] E. M. M. Wingstedt, D. Eriksson, O. Parmhed, G. Leroy, A. N. Osnes, B. A. Pettersson Reif, J. Burman. Large Eddy Simulation of dispersion of neutral and non-neutral scalar fields in complex urban-like geometries.
- [97] Duynkerke, P.G. (1988) « Application of the E- ϵ Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer ». *J. Atmos. Sci.*, 45, 865-880.
- [98] Richards, P.J., & Hoxey, R.P. 1993. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k- ϵ turbulence model. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 46 & 47, 145153. 45, 46, 51
- [99] D. M. Hargreaves et N. G. Wright, « On the use of the k- ϵ model in commercial CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer », *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 95, no 5, p. 355-369, mai 2007.
- [100] B. Blocken, T. Stathopoulos, et J. Carmeliet, « CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems », *Atmospheric Environment*, vol. 41, no 2, p. 238-252, janv. 2007.
- [101] Duynkerke, P.G. 1988. Application of the E- ϵ Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer. *J. Atmos. Sci.*, 45, 865-880. 39, 126.
- [102] Emmanuel Demaël. Thèse de doctorat de l'École Nationale des Ponts et Chaussées. Novembre 2007.
- [103] Riddle, A., Carruthers, D., Sharpe, D., McHigh, A., & Tocker, C. 2004. Comparisons between Fluent and ADMS for atmospheric dispersion modelling. *Atmos. Environ.*, 38, 1029-1038. 45.
- [104] Vendel, F. (2011) Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels, PhD thesis, L'École Centrale de Lyon, France.
- [105] D. Vandromme. Contribution à la modélisation et à la prédiction d'écoulements turbulents à masse volumique variable . PhD thesis, Université de Lille, 1983

- [106] H. Kim and V. Patel. Test of turbulence models for wind flow over terrain with separation and recirculation, *Boundary Layer Meteorology*, 94, 2000.
- [107] M. Bottema. « Turbulence closure model “constants” and the problems of “inactive” atmospheric turbulence », *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 67-68, p. 897-908, avr. 1997.
- [108] M. Balogh, A. Parente, et C. Benocci, « RANS simulation of ABL flow over complex terrains applying an Enhanced $k-\epsilon$ model and wall function formulation: Implementation and comparison for fluent and OpenFOAM », *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 104-106, p. 360-368, mai 2012.
- [109] R. Batt, S. Gant, J. M. Lacome, B. Truchot, et H. Tucker, « CFD modelling of dispersion in neutrally and stably-stratified atmospheric boundary layers: results for Prairie Grass and Thorney Island », *International Journal of Environment and Pollution*, vol. 63, no 1/2, p. 1, 2018.
- [110] X. Wei, E. Dupont, E. Gilbert, L. Musson-Genon, et B. Carissimo, « Experimental and Numerical Study of Wind and Turbulence in a Near-Field Dispersion Campaign at an Inhomogeneous Site », *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 160, n° 3, p. 475-499, sept. 2016.
- [111] E. Yee et C. A. Biltoft, « Concentration Fluctuation Measurements in a Plume Dispersing Through a Regular Array of Obstacles », *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 111, n° 3, p. 363-415, juin 2004.
- [112] Nironi C. et al., 2015: Dispersion of a Passive Scalar Fluctuating Plume in a Turbulent Boundary Layer. Part I: Velocity and Concentration Measurements. *Boundary-Layer Meteorol.* 156, 415–446.
- [113] Experimental and numerical study of atmospheric turbulence and dispersion in stable conditions and in near field at a complex site. X. Wei. Thèse de doctorat en Sciences et Techniques de l'Environnement. 2016
- [114] R. Vasaturo, I. Kalkman, B. Blocken, et P. J. V. V. Wesemael, « Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics Large eddy simulation of the neutral atmospheric boundary layer : performance evaluation of three in flow methods for terrains with different roughness », *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*, vol. 173, n° January 2017, p. 241–261, 2018.
- [115] G. R. Tabor et M. H. Baba-Ahmadi, « Inlet conditions for large eddy simulation: A review », *Computers Fluids*, vol. 39, n° 4, p. 553-567, avr. 2010.
- [116] T. Baalisampang, R. Abbassi, V. Garaniya, F. Khan, and M. Dadashzadeh, 'Accidental release of Liquefied Natural Gas in a processing facility: Effect of equipment congestion level on dispersion behaviour of the flammable vapour', *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 61, pp. 237–248, Sep. 2019, doi: 10.1016/j.jlp.2019.07.001.
- [117] A. Dasgotra, G. V. V. Varun Teja, A. Sharma, and K. B. Mishra, 'CFD modeling of large-scale flammable cloud dispersion using FLACS', *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 56, pp. 531–536, Nov. 2018, doi: 10.1016/j.jlp.2018.01.001.
- [118] G. C. Efthimiou, S. Andronopoulos, R. Tavares, and J. G. Bartzis, 'CFD-RANS prediction of the dispersion of a hazardous airborne material released during a real accident in an industrial environment', *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 46, pp. 23–36, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.jlp.2017.01.015.
- [119] A. D. Galeev, E. V. Starovoytova, and S. I. Ponikarov, 'Numerical simulation of the consequences of liquefied ammonia instantaneous release using FLUENT software', *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 91, no. 3, pp. 191–201, May 2013, doi: 10.1016/j.psep.2012.05.002.
- [120] F. Gavelli, E. Bullister, and H. Kytomaa, 'Application of CFD (Fluent) to LNG spills into geometrically complex environments', *Journal of Hazardous Materials*, vol. 159, no. 1, pp. 158–168, Nov. 2008, doi: 10.1016/j.jhazmat.2008.02.037.
- [121] M. Pontiggia et al., 'CFD model simulation of LPG dispersion in urban areas', *Atmospheric Environment*, vol. 45, no. 24, pp. 3913–3923, Aug. 2011, doi: 10.1016/j.atmosenv.2011.04.071.
- [122] A. M. Schleder and M. R. Martins, "Experimental data and CFD performance for CO2 cloud dispersion analysis", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 43, pp. 688–699, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.jlp.2016.03.027.
- [123] A. Venetsanos, T. Huld, P. Adams, and J. . Bartzis, 'Source, dispersion and combustion modelling of an accidental release of hydrogen in an urban environment', *Journal of Hazardous Materials*, vol. 105, no. 1–3, pp. 1–25, Dec. 2003, doi: 10.1016/j.jhazmat.2003.05.001.
- [124] H. Wilkening and D. Baraldi, "CFD modelling of accidental hydrogen release from pipelines", *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 32, no. 13, pp. 2206–2215, Sep. 2007, doi: 10.1016/j.ijhydene.2007.04.022.
- [125] S. Yang, K. Jeon, D. Kang, and C. Han, "Accident analysis of the Gumi hydrogen fluoride gas

- leak using CFD and comparison with post-accidental environmental impacts”, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 48, pp. 207–215, Jul. 2017, doi: 10.1016/j.jlp.2017.05.001.
- [126] Griffiths and Megson, The effect of uncertainties in human toxic response on hazard range estimation for ammonia and chlorine. *Atmospheric Environment* Vol. 8, No 18 No. 6, p. 1195-1206, 1984.
- [127] Mylne K.R., 1988. Experimental measurements of concentration fluctuations. Pp. 555-565 in *Air pollution modelling and its Application VII*, ed. Han van Dop, Plenum Press, New York.
- [128] D.J. Thomson, Meteorological Office. The Fluctuations Module. ADMS 1.0. P13/01E/92.
- [129] Mavroidis, S. Andronopoulos, J.G. Bartzis, R.F. Griffiths. Atmospheric dispersion in the presence of a three-dimensional cubical obstacle: Modelling of mean concentration and concentration fluctuations. *Atmospheric Environment* 41 (2007) 2740–2756.
- [130] R. . Sykes et D. . Henn, « Large-eddy simulation of concentration fluctuations in a dispersing plume », *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, vol. 26, n° 17, p. 3127-3144, déc. 1992.
- [131] Z. Xie, P. Hayden, P. Voke, et A. Robins, « Large-eddy simulation of dispersion: comparison between elevated and ground-level sources », *Journal of Turbulence*, vol. 5, août 2004.
- [132] Massimo Cassiani, Hamidreza Ardeshiri, Soon-Young Park, Andreas Stohl, Massimo Marro, Pietro Salizzoni, Ignacio Pizzo, Kerstin Stebel, Solvejg Dinger, Arve Kylling. A large eddy simulation study of mean dispersion and concentration fluctuations from a point source. *International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 9-12 October 2017, Bologna, Italia.*
- [133] L. Mortarini and E. Ferrero. A Lagrangian Stochastic Model for the concentration fluctuations. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 5, 3621–3639, 2005.
- [134] Sawford B.L. (1983). "The effect of Gaussian particle-pair distribution functions in the statistical theory of concentration fluctuations in homogeneous turbulents", *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, 109, 339-354.
- [135] Thompson 1990. A stochastic model for the motion of particle pairs in isotropic high-Reynolds number turbulence, and its applications to the problem of concentration variance, *J. Fluid Mech.*, 210, 133-153.
- [136] J.G. Bartzis, A. Sfetsos, S. Andronopoulos. On the individual exposure from airborne hazardous releases: The effect of atmospheric turbulence. *Journal of Hazardous Materials* 150 (2008) 76–82.
- [137] M. Nielsen, H. E. Jørgensen and S. Ott (2001): Prediction of concentration fluctuations in short-distance gas dispersion. 7th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Bolograte, Italy, May 28-31. 2001.
- [138] L. M. Sweeney, D. R. Sommerville, M. R. Goodwin, R. A. James, and S. R. Channel, “Acute toxicity when concentration varies with time: A case study with carbon monoxide inhalation by rats”, *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, vol. 80, pp. 102–115, Oct. 2016, doi: 10.1016/j.yrtph.2016.06.014.
- [139] J. V. Bruckner, D. A. Keys, and J. W. Fisher, “The Acute Exposure Guideline Level (AEGLE) Program: Applications of Physiologically Based Pharmacokinetic Modeling”, *Journal of Toxicology and Environmental Health, Part A*, vol. 67, no. 8–10, pp. 621–634, Apr. 2004, doi: 10.1080/15287390490428017.
- [140] Evaluation of local-scale models for accidental releases in built environments –results of the “Michelstadt exercise” in COST Action ES1006. Baumann-Stanzer K., Leidl B., Trini Castelli S., Milliez C.M., Berbekar E. , Rakai A., Fuka V., Hellsten A., Petrov A., Efthimiou G., Andronopoulos S., Tinarelli G., Tavares R., Armand P., Gariazzo C. and all COST ES1006 Members. 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. Varna (Bulgarie).
- [141] M. Lateb, R. N. Meroney, M. Yataghene, H. Fellouah, F. Saleh, et M. C. Boufadel, « On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments – A review », *Environmental Pollution*, vol. 208, p. 271-283, janv. 2016.
- [142] Moditic - large eddy simulations of dispersion of neutral and non-neutral scalar fields in complex urban-like geometries. E. M. M. Wingstedt, D. Eriksson, O. Parmhed, G. Leroy, A. N. Osnes, B. A. Pettersson Reif and J. Burman. 17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 9-12 May 2016, Budapest, Hungary.
- [143] Pope, S. B. 2000, *Turbulent flows*, IOP Publishing. [Cité en pages iii, v, 43, 45, 48, 49, 51, 52, 60, 63, 78, 81, 82, 194, and 198.]
- [144] Thomson, D. 1987, Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in

- turbulent flows, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 180, p. 529–556. [Cité en pages iii, v, 53, 55, 59, 60, 194, and 195.]
- [145] M. L. Bahlali, C. Henry, et B. Carissimo, « On the Well-Mixed Condition and Consistency Issues in Hybrid Eulerian/Lagrangian Stochastic Models of Dispersion », *Boundary-Layer Meteorology*, oct. 2019.
- [146] S. M. Salim, R. Buccolieri, A. Chan, et S. Di Sabatino, « Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES », *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 99, n° 2-3, p. 103-113, févr. 2011.
- [147] Meissam Bahlali, Carissimo Bertrand, Dupont Eric. Adaptation of the Lagrangian module of a CFD code for atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries and comparison with existing Eulerian results. International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 9-12 October 2017, Bologna, Italia.
- [148] N. Jarrin, R. Prosser, J.-C. Uribe, S. Benhamadouche, et D. Laurence, « Reconstruction of turbulent fluctuations for hybrid RANS/LES simulations using a Synthetic-Eddy Method », *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 30, n° 3, p. 435-442, juin 2009.
- [149] Jean-Marc Lacomme, Guillaume Leroy, Benjamin Truchot, Lauris Joubert, Xiao Wei, Eric Dupont, Eric Gilbert, Bertrand Carissimo. Large-eddy simulation of wind flows and comparisons with very-near field campaign data. 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO 16), Varna (Bulgarie), 2014.
- [150] D. Anfossi, G. Tinarelli, S. Trini Castelli, M. Nibart, C. Olry, et J. Commanay, « A new Lagrangian particle model for the simulation of dense gas dispersion », *Atmospheric Environment*, vol. 44, n° 6, p. 753-762, févr. 2010.
- [151] Félix Gomez, Bruno Ribstein, Laurent Makké, Patrick Armand, Jacques Moussafir, and Maxime Nibart.. Simulation of a dense gas chlorine release with a lagrangian particle dispersion model (LMPD). International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 3 - 6 June 2019, Bruges, Belgium.
- [152] Nicolas Maquignon. Vers un modèle multiphasés et multicomposants (MPMC) de type Lattice Boltzmann Method (LBM) pour la simulation dynamique d'un fluide cryogénique dans l'eau. Traitement du signal et de l'image. Université du Littoral Côte d'Opale, 2015. Français.
- [153] N. H. Ahmad, A. Inagaki, M. Kanda, N. Onodera, et T. Aoki, « Large-Eddy Simulation of the Gust Index in an Urban Area Using the Lattice Boltzmann Method », *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 163, n° 3, p. 447-467, juin 2017.
- [154] G. Habilomatis et A. Chaloulakou, « Ultrafine particles dispersion modeling in a street canyon: Development and evaluation of a composite lattice Boltzmann model », *Science of The Total Environment*, vol. 463-464, p. 478-487, oct. 2013.
- [155] L. Merlier, J. Jacob, et P. SAGAUT, « Lattice-Boltzmann Large-Eddy Simulation of pollutant dispersion in street canyons including tree planting effects », *Atmospheric Environment*, vol. 195, p. 89-103, déc. 2018.
- [156] F. J. Jiménez-Hornero, J. V. Giráldez, E. Gutiérrez de Ravé, et F. J. Moral, « Description of pollutant dispersion in an urban street canyon using a two-dimensional lattice model », *Atmospheric Environment*, vol. 41, n° 1, p. 221-226, janv. 2007.
- [157] M. B. Liu et G. R. Liu, « Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): An Overview and Recent Developments », *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 17, n° 1, p. 25-76, mars 2010.
- [158] J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, *Rep. Progress Phys.* 68 (2005) 1703–1759.
- [159] J. J. Monaghan et J. B. Kajtár, « SPH particle boundary forces for arbitrary boundaries ». *Computer Physics Communications*, vol. 180, n° 10, p. 1811-1820, oct. 2009.
- [160] Cao, Z., Patra, A., Bursik, M., Pitman, E. B., and Jones, M.: Plume-SPH 1.0: a three-dimensional, dusty-gas volcanic plume model based on smoothed particle hydrodynamics, *Geosci. Model Dev.*, 11, 2691–2715, <https://doi.org/10.5194/gmd-11-2691-2018>, 2018.
- [161] M. Hort et al., « Atmospheric dispersion knowledge gaps and research priorities: results from a recent survey of 3 members ». International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 3 - 6 June 2019, Bruges, Belgium.
- [162] M. B. Dillon, « The role of deposition in limiting the hazard extent of dense-gas plumes », *Journal of Hazardous Materials*, vol. 164, n° 2-3, p. 1293-1303, Mai 2009.
- [163] S. Hanna et al., « Comparison of six widely-used dense gas dispersion models for three recent chlorine railcar accidents », *Process Safety Progress*, vol. 27, n° 3, p. 248-259, sept. 2008.
- [164] B. McKenna et al., « Jack Rabbit II 2015 chlorine release experiments: simulations of the trials using drift and Phast », p. 20, 2017.
- [165] Evaluation sanitaire des particules, Etat de l'art. Record. Etude N°06-0666/1A.

- [166] Underwood, P., 2001: Review of deposition velocity and washout coefficient. Atmospheric Dispersion Modelling Liaison Committee, Annual Report 1998/99, ISBN 0 85951 454 4. Available from: <https://admlc.com/publications/>, accessed 28 February 2019.
- [167] Wesely (1989), Parametrization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models, *Atmospheric Environment* 23 (6) : 1293-1304.
- [168] R. Buccolieri, J.-L. Santiago, E. Rivas, et B. Sanchez, « Review on urban tree modelling in CFD simulations: Aerodynamic, deposition and thermal effects », *Urban Forestry & Urban Greening*, vol. 37, p. 56-64, janv. 2019.
- [169] Fox, S., R. Meris, L. Stockham, T. Mazzola, J. Chang, S. Hanna, T. Spicer, M. Sohn, D. Nicholson and A. Byrnes, 2017: Overview of the 2016 Jack Rabbit II Chlorine Release Field Trials, 21st Annual George Mason University Conference on Atmospheric Transport and Dispersion Modeling, Fairfax, Virginia, USA, 13-15 June 2017.
- [170] Spicer, T. and A. Feuvrier, 2017: Investigating the reactivity of chlorine with environmental materials in relevant, controlled conditions, International Workshop on Physical Modelling of Flow and Dispersion Phenomena (PHYSMOD), Ecole Centrale de Nantes, France, 24 August 2017.
- [171] Hanna, S.R., "Hazardous Gas Model Evaluations. Is an Equitable Comparison Possible ?" *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol 7, No.2, pp133 138, 1993.
- [172] Hanna, Chang and Strimaitis. Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations", *Atmospheric Environment*, Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993.
- [173] Britter, R.E. The evaluation of technical models used for major-accident hazard installations. EUR 14774, 1992.
- [174] Model Evaluation Group (MEG), (1994), Model evaluation protocol, European Communities, Directorate-General XII, Science Research and Development
- [175] J. C. Chang and S. R. Hanna. Air Quality model performance Evaluation. *Meteorol. Atmos. Phys.* 87, 167–196, 2004.
- [176] Hanna S. R., Chang, R. Britter and M; Neophytou. Overview of model evaluation history and procedures in the atmospheric air quality area. *Network Newsletter*. Volume 2, No. 1 -April 2003.
- [177] Carissimo B., Jagger S.F., Daish N.C., Halford A., Selmer-Olesen S., Riikonen K., Perroux J;M., Würtz J. The SMEDIS database and validation exercise. *Int. J. Environnement and Pollution*, Vol. 16, Nos. 1-6, p 614-629, 2001.
- [178] E. Demael and B. Carissimo. Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*. Vol. 47, No. 3 (March 2008), pp. 888-900
- [179] Britter, R.E. Recent research on the dispersion of hazardous materials. *Industrial safety environment and climate programme*. EUR 18198 EN, 1998.
- [180] S. Hanna, J. Chang, et T. Mazzola. « Summary findings of the model evaluation and comparison: Jack Rabbit II case study ». International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 3 - 6 June 2019, Bruges, Belgium.

10 Annexes

Liste des annexes :

- Annexe 1 : Définition des échelles atmosphériques
- Annexe 2 : Formulation des modèles gaussiens et description des écarts types
- Annexe 3 : Principales campagnes expérimentales utilisées dans les évaluations des modèles de dispersion atmosphérique de gaz toxiques

Annexe 1 :
Définition des échelles atmosphériques

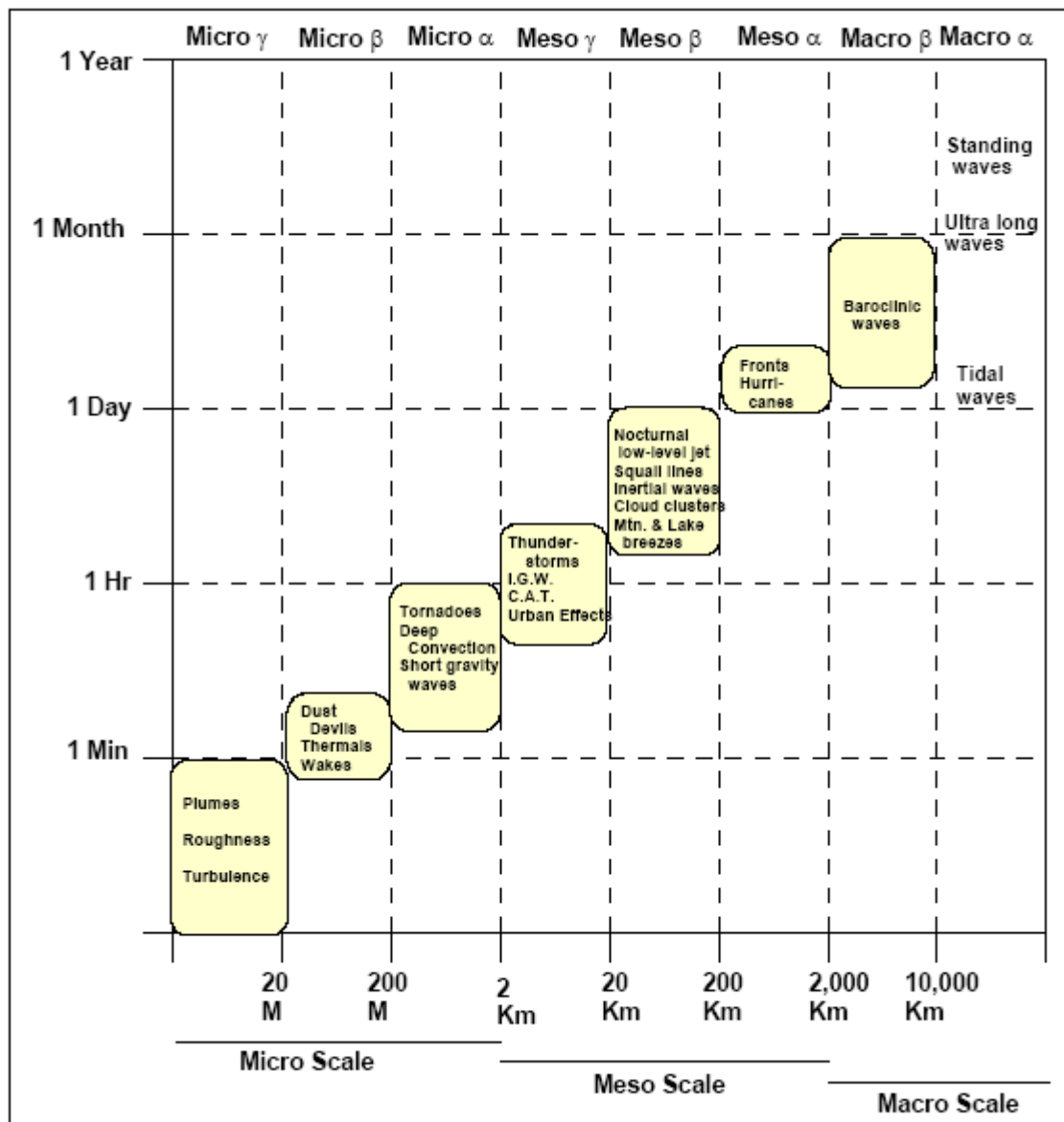


Figure 23 : (issu de l'Office of the Federal Coordinator for Meteorology) définition des échelles météorologiques et des différents processus atmosphériques avec les temps caractéristiques et les échelles horizontales (adapté de Orlandi, I., 1975: A rational subdivision of scales for atmospheric processes. Bull. Amer. Meteor. Soc., 56, 527–530.) (C.A.T. "Clear Air Turbulence", I.G.W. : "Inertial Gravity Waves").

Annexe 2 :

Formulation des modèles gaussiens et description des écarts types

1 Formulation des écarts-types

1.1 Rejet instantané

Dans le cas du rejet ponctuel et instantané d'une masse de gaz M, la concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x,y,z) est de la forme :

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-x_0-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z+z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]$$

- C : concentration [kg/m³];

- M : masse de produit libéré [kg];

$\left. \begin{array}{l} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{array} \right\}$: coordonnées de la source de produit [m];

$\left. \begin{array}{l} x \\ y \\ z \end{array} \right\}$: coordonnées du point où l'on calcule la concentration [m];

- u : vitesse moyenne du vent [m/s];

- t : temps depuis l'émission du gaz;

$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{array} \right\}$: écarts-types de la distribution gaussienne de la quantité M de gaz par rapport à sa localisation à l'instant t [m];

- α : coefficient de réflexion au sol²⁴.

Rejet continu – Modèle « à bouffées »

Pour modéliser un rejet continu, il est possible de considérer l'émission d'une succession de rejets instantanés qui évolueront de façon gaussienne.

Le rejet de débit en fonction du temps Q(t) peut se décomposer en n rejets instantanés de masse M_i tels que :

$$M_i = Q\left(\frac{t_{i-1} + t_i}{2}\right) (t_i - t_{i-1})$$

Le j^{ème} rejet instantané, indicé i, est émis à l'instant t_i et a une masse M_i. La concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x,y,z) est alors de la forme :

24 Un terme de réflexion au sol peut être pris en compte pour modéliser la capacité de réflexion ou d'absorption du produit sur le sol, l'eau ou les végétaux. De façon évidente, ce phénomène est plus ou moins accentué suivant la nature du produit et l'environnement. $\alpha = 0$: absorption totale et $\alpha = 1$: réflexion totale pour un sol non poreux avec un produit ne pouvant réagir avec ce sol ou la végétation (un gaz comme l'air sur du béton).

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{M_i}{(2\pi)^{3/2} \sigma_{x_i} \sigma_{y_i} \sigma_{z_i}} \exp\left(-\frac{[x - x_0 - u(t - t_i)]^2}{2\sigma_{x_i}^2} - \frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_{y_i}^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_{z_i}^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z + z_0)^2}{2\sigma_{z_i}^2}\right) \right]$$

- M_i : Masse du $i^{\text{ème}}$ rejet instantané [kg] ;
- u : vitesse moyenne du vent [m/s] ;
- n : nombre de rejets instantanés considérés ;
- t_i : instant de fin d'émission du $i^{\text{ème}}$ rejet [s] ;
- t_{i-1} : instant de fin d'émission du $(i-1)^{\text{ème}}$ rejet et début d'émission du $i^{\text{ème}}$ rejet [s] ;
- $\left. \begin{array}{l} \sigma_{x_i} \\ \sigma_{y_i} \\ \sigma_{z_i} \end{array} \right\}$: écarts-types de la distribution gaussienne du $i^{\text{ème}}$ rejet instantané de masse M_i par rapport à sa localisation à l'instant t [m] ;
- α : coefficient de réflexion au sol.

1.2 Rejet continu – Modèle « panache »

Si le rejet est continu (voir le chapitre 4.3.2) et si la vitesse de vent est suffisamment importante pour que le phénomène de diffusion dans la direction du vent soit négligeable devant le phénomène de convection, la concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x,y,z) peut s'écrire :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z + z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right]$$

Calcul des écarts types

L'utilisation des modèles gaussiens impose donc la détermination des écarts-types ([45], [46], [56], [57], [60]).

A partir de campagnes de mesures sur des rejets de produits, des formules ont été établies, donnant la valeur des écarts-types en fonction :

- de la distance d'éloignement de la source de rejet (Pasquill, Turner, Briggs) ;
- ou encore du temps de transfert (Doury).

Les écarts types ont été calés pour des distances de dispersion de l'ordre de la dizaine de kilomètres au maximum.

Les écarts types de la loi gaussienne dépendent :

- de la distance à la source ou de la durée de transfert ;
- des caractéristiques de la structure de l'atmosphère ;
- et de la rugosité du site.

Corrélation de Pasquill-Turner

Les écarts-types de Pasquill ont été déterminés pour les modèles « panache » à partir des mesures de « Prairies Grass » menées en Grande Bretagne, en 1960. Ces mesures ont été faites sur un terrain plat, bien dégagé, peu rugueux (de l'ordre de 3 cm).

En fonction des classes de stabilité atmosphérique de Pasquill (voir le chapitre 4 du corps de texte), les valeurs des écarts-types ont été formulées en fonction à la distance de la source (valable pour des distances supérieures à 100 m et inférieures à 10 km).

Les valeurs des écarts types σ_y et σ_z proposées par Pasquill correspondent à des durées d'échantillonnage de 10 minutes, et une hauteur de source qui n'excède pas les premières centaines de mètres.

La relation pour calculer les écarts type est de la forme :

$$\sigma = a \cdot x^b + c$$

Les valeurs de a, b et c ([61]) **Erreur ! Source du renvoi introuvable.** sont reportées dans les tableaux suivants pour respectivement σ_y et σ_z (x , σ_y et σ_z sont exprimés en km).

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	a	b	c
A	0,215	0,858	0
B	0,155	0,889	
C	0,105	0,903	
D	0,068	0,908	
E	0,05	0,914	
F	0,034	0,908	

Tableau 5 : Coefficients relatifs à σ_y

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	a	b	c
A	0,467	1,89	0,01
B	0,103	1,11	0
C	0,066	0,915	0
D	0,0315	0,822	0
E si $x < 1$ km	0,0232	0,745	0
E si $x > 1$ km	0,148	0,15	-0,126
F si $x < 1$ km	0,0144	0,727	0
F si $x > 1$ km	0,0312	0,306	-0,017

Tableau 6 :: Coefficients relatifs à σ_z

La Figure 24 illustre l'évolution des écarts types de dispersion de Pasquill-Gifford-Turner (PGT) en fonction de la distance.

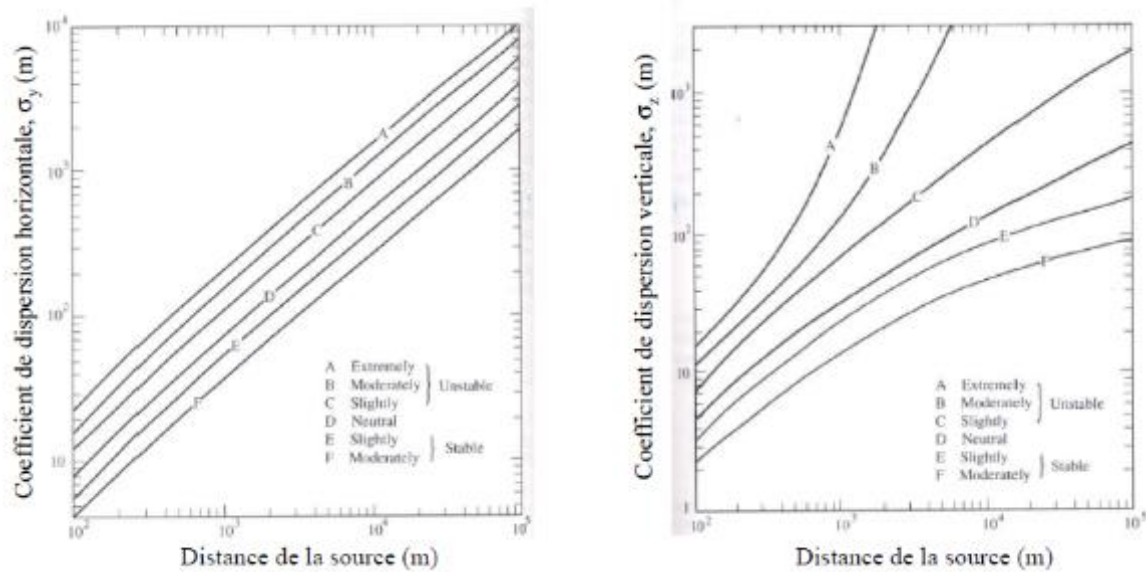


Figure 24 : Coefficient de dispersion horizontale et verticale en fonction de la distance (d'après [57])

Corrélation de Davidson

Pasquill est par ailleurs associé à d'autres auteurs (Turner, Gifford...) qui ont établi des formules plus ou moins proches. L'une de ces formulations est celle de Davidson [27].

La relation de Davidson pour estimer les écarts types est de la forme :

$$\sigma = a \cdot x^{(b+c \cdot \log(x))}$$

Les valeurs de a, b et c sont reportées dans les tableaux suivants pour respectivement σ_y et σ_z (x est exprimé en km et σ_y, σ_z en m).

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	a	b	c
A	209,6	0,8804	-0,006902
B	154,7	0,8932	-0,006271
C	103,3	0,9112	-0,004845
D	68,28	0,9112	-0,004845
E	51,05	0,9112	-0,004845
F	33,96	0,9112	-0,004845

Tableau 7 : Coefficients relatifs à σ_y

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	a	b	c
A	417,9	2,058	0,2499
Pour plus de précisions avec la classe A si $0,10 < x < 0,45$ km	310,4	1,773	0,1879
Pour plus de précisions avec la classe A si $0,45 < x < 3,1$ km	453,9	2,117	0
B	109,8	1,064	0,01163
C	61,14	0,9147	0
D	30,38	0,7309	-0,032
E	21,14	0,6802	-0,04522
F	13,72	0,6584	-0,05367

Tableau 8 : Coefficients relatifs à σ_z

Corrélation de Briggs

Une autre corrélation des écarts types basée sur les essais de Pasquill est celle de Briggs.

La relation pour estimer les écarts types est de la forme :

$$\sigma = a \cdot x^{(b+c \cdot \log(x))}$$

Les valeurs de a, b et c sont reportées dans les tableaux suivants pour respectivement σ_y et σ_z (x, σ_y , et σ_z sont exprimés en m).

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	σ_y (m)	σ_z (m)
A	$0.22x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.20x$
B	$0.16x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.12x$
C	$0.11x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.0002x)^{-1/2}$
D	$0.08x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.06x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$
E	$0.06x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.03x(1 + 0.0003x)^{-1}$
F	$0.04x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.016x(1 + 0.0003x)^{-1}$

Tableau 9 : Coefficients relatifs à σ_y et σ_z suivant la formulation de Briggs (1973) en "Open-Country Conditions"

Corrélation de Doury

Les écart-types de Doury ont été déterminés à partir d'un grand nombre de données expérimentales recueillies par Sandia Corporation, en 1966. En fonction des classes de stabilité atmosphérique de Doury, les valeurs des écarts-types sont fonction du temps de transfert et de la stabilité atmosphérique.

La relation pour calculer les écarts type est de la forme :

$$\sigma_y = (A_h t)^{K_h}$$

$$\sigma_z = (A_z t)^{K_z}$$

Les valeurs de A_h , A_z , K_h et K_z sont reportées dans les tableaux suivants pour respectivement σ_y et σ_z (t est exprimé en s et σ_y, σ_z en m).

Diffusion normale (DN)

Temps de transfert [s]	A_h	A_z	K_h	K_z
	[m ^{1/k} /s] k= K_h ou K_z			
0 < t < 240	0,405	0,42	0,859	0,814
240 < t < 3 280	0,135	1,00	1,130	0,685
3 280 < t < 97 000	0,135	20,0	1,130	0,500
97 000 < t < 508 000	0,463	20,0	1,000	0,500
508 000 < t < 1 300 000	6,50	20,0	0,824	0,500
t > 1 300 000	2 10 ⁵	20,0	0,500	0,500

Tableau 10 : Coefficients relatifs aux écarts-types

Diffusion faible (DF)

Temps de transfert [s]	A_h	A_z	K_h	K_z
	[m ^{1/k} /s] k= K_h ou K_z			
0 < t < 240	0,405	0,20	0,859	0,500
240 < t < 97 000	0,135	0,20	1,130	0,500
97 000 < t < 508 000	0,463	0,20	1,000	0,500
508 000 < t < 1 300 000	6,50	0,20	0,824	0,500
t > 1 300 000	2 10 ⁵	0,20	0,500	0,500

Tableau 11 : Coefficients relatifs aux écarts-types

1.3 Source ponctuelle

Le modèle gaussien considère une source d'émission ponctuelle. Dans le cas contraire, il est toutefois possible de se ramener à un ensemble de sources ponctuelles.

Une source est ponctuelle si ses dimensions sont petites devant celles du nuage de gaz aux premiers instants de l'observation considérée. Dans le cas d'une source non ponctuelle, il est possible d'admettre que tout se passe comme si cette source était le résultat de la dispersion d'une source ponctuelle placée en amont de celle-ci.

Ceci revient à ajouter aux écarts-types précédents un écart-type tel que [UIC, 1995] :

$$\sigma_{i\theta} = \frac{a_i}{(2\pi)^{1/2}}$$

avec a_i : la dimension de la source dans la direction i ,
soit à retenir un écart-type :

$$\sigma_i = (\sigma_{i0}^2 + \sigma_{i\theta}^2)^{1/2}$$

avec σ_{i0} : écart-type sans correction.

Cette relation assure l'égalité des quantités de matière contenues dans le volume πa_i et la bouffée d'écarts-types σ_i en supposant une répartition gaussienne de la matière.

1.4 Rugosité

Le modèle gaussien traduit la présence d'obstacles et de la végétation sous la forme d'un paramètre global de rugosité. Les écarts-types de Doury ont été calés sur des terrains de rugosités très variées. En revanche, les écarts-types de Pasquill ont été déterminés pour une rugosité de 3 cm.

Pour tenir compte d'une valeur de rugosité différente, il s'agit de corriger l'écart-type dans la direction verticale σ_z (certains modèles considèrent aussi une modification des écarts-types dans la direction horizontale).

Ainsi, Turner propose la correction établie par Smith, selon laquelle [63] :

$$\sigma_z = a x^s \text{ avec } x \text{ [km]}$$

Classe de stabilité	Coefficient a			Coefficient s		
	Rugosité					
	1 cm	10 cm	1 m	1 cm	10 cm	1 m
A	0,102	0,140	0,190	0,94	0,90	0,83
B	0,062	0,080	0,110	0,89	0,85	0,77
C	0,043	0,056	0,077	0,85	0,80	0,72
D	0,029	0,038	0,050	0,81	0,76	0,68
E	0,017	0,023	0,031	0,78	0,73	0,65
F	0,009	0,012	0,017	0,72	0,67	0,58

Tableau 12 : Facteur correctif relatif à la rugosité

Le TNO propose la correction suivante [34] :

$$\frac{\sigma'_{z0}}{\sigma_{z0}} = \left[\frac{z_0'}{z_0} \right]^p$$

Avec :

- $p = 0,53 x^{-0,22}$ (x en m) ;

- Z'_0 : la rugosité corrigée ;
- σ'_{z_0} : l'écart-type pour la rugosité Z'_0 ;
- σ_{z_0} : l'écart-type pour la rugosité z_0 .

2 Ecart-types et « averaging time »

Les formules des écarts-types ont été établies sur la base de résultats expérimentaux représentatifs d'une situation moyenne dans le temps s'étendant de quelques minutes à une heure. Les valeurs des écarts-types reflètent donc la dispersion pour un milieu de nature équivalente au site expérimental. Certaines corrections peuvent toutefois être apportées, celles-ci sont décrites ci-après.

Le temps d'observation implicite d'un modèle est celui qui a permis la détermination des valeurs des écart-types. Par exemple, les corrélations des écarts-types supposent des durées d'échantillonnage de 10 minutes pour Pasquill et de 3 minutes pour Sutton.

Pour des temps d'observation plus longs, la variabilité du vent en vitesse et direction entraîne une dispersion supplémentaire qui fait que le modèle sur-estime (cf. Figure 25) la concentration intégrée sous le vent et sous-estime la largeur du panache. La distribution spatiale de la concentration est assez étroite dans le cas d'un panache "instantané" alors que la distribution est plus large et devient gaussienne pour des durées d'échantillonnage plus importantes.

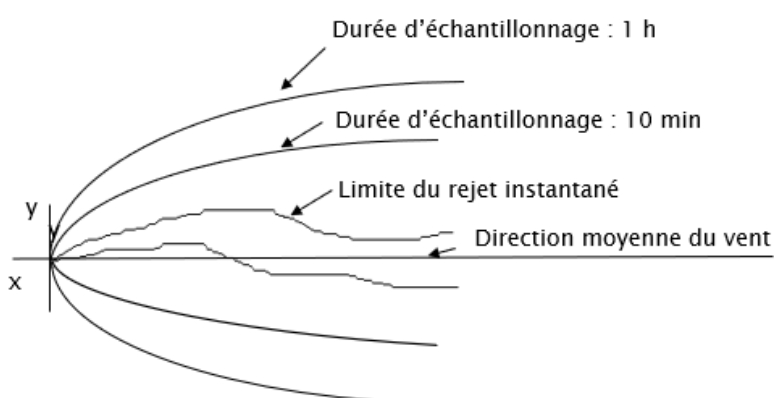


Figure 25: Représentation des limites d'un panache en fonction du temps d'intégration d'après Seinfeld [62]

Historiquement, Turner [63] a été parmi les premiers à quantifier l'effet de la durée d'échantillonnage sur la concentration par le rapport suivant :

$$\frac{C_t}{C_{3\text{min}}} = k$$

Equation 9

avec :

- $C_{3\text{min}}$ concentration sous le vent pour une durée d'échantillonnage de 3 min ;
- C_t concentration mesurée sous le vent pour une durée d'échantillonnage t ;
- k : facteur correctif.

Durée d'observation t	Facteur correctif k
3 min	1
15 min	0,82
1 h	0,61
3 h	0,51
24 h	0,36

Tableau 13 : Facteur correctif relatif au temps d'observation selon Turner [63]

Turner suggère que la variation de la concentration en fonction de la durée d'échantillonnage de la mesure, appelée également **averaging time**, exprimée par les résultats donnés dans le Tableau 13, peut être approchée par la fonction puissance donnée ci-dessous :

$$C_m = C_r \left(\frac{t_r}{t} \right)^p$$

Equation 10

où :

- C_r est la concentration retenue pour les petites échelles de temps t_r , qui désigne le temps de référence d'échantillonnage ou averaging time qui a permis la mesure expérimentale, soit 3 min pour Turner, ou 10 min pour Pasquill ;
- C_m est la concentration pour un averaging time t .

La valeur de p varie selon les auteurs, il est généralement accepté une valeur de l'ordre de 0,2 ([1],[38]).

Dans la formulation gaussienne, la concentration moyenne sur l'axe est inversement proportionnelle à σ_y et σ_z or l'écart-type σ_y est beaucoup plus sensible que σ_z au choix de l'averaging time. En effet, sur le plan vertical une taille maximale des tourbillons, en l'absence d'obstacle, permet de définir un temps moyen à partir duquel on n'observe plus de changement dans la distribution moyennée.

En revanche, dans le plan horizontal des fluctuations latérales du vent peuvent entraîner un balayage ou un serpentement ("meandering") important du panache. Cet effet est particulièrement sensible par vent léger dans le cas d'une atmosphère stable : on observe alors des fluctuations latérales de grande période due aux grandes échelles de turbulence. Bien que l'averaging time dû au meandering des grandes échelles de turbulence soit difficile à estimer, les expérimentateurs supposent que l'effet des grandes échelles de turbulence ait été appréhendé durant la période d'échantillonnage.

Suivant la relation de Turner (Equation 11), Gifford [55] a proposé et utilisé une approche pour modéliser l'évolution des écarts types latéraux des gaussiens σ_y , en fonction de l'averaging time. Cela donne :

$$\sigma_{y1}(t_{av,1}) = \sigma_{y2}(t_{av,2}) \left(\frac{t_{av,1}}{t_{av,2}} \right)^p$$

Equation 11

où :

- $\sigma_{y1}(t_{av,1})$ est l'écart type pour un averaging time $t_{av,1}$.
- $\sigma_{y2}(t_{av,2})$ est l'écart type latéral ou également appelé dimension du panache instantané, retenu pour l'averaging time $t_{av,2}$.

Doury [56] **Erreur ! Source du renvoi introuvable.** a proposé également une correction assez semblable qui s'exprime de la façon suivante [UIC, 1995] :

$$\frac{\sigma_{yT}}{\sigma_{yT_0}} = \frac{C_{\max T_0}}{C_{\max T}} = \left[\frac{T}{T_0} \right]^{\alpha \exp\left(-\frac{T}{24}\right)}$$

Equation 12

avec

- T : la durée d'observation effective ;
- T_0 : la durée d'échantillonnage de référence (environ 0,1h) ;

- t : la durée de transfert du polluant [h] ;
- α : exposant sans dimension ;
- C_{\max} : concentration sous le vent.

Durée d'observation [h]	Exposant sans dimension α
0 à 0,1	0
0,1 à 1	0,50
1 à 4	0,40
4 à 24	0,25
24 à ∞	0

Tableau 14 : Facteur correctif relatif au temps d'observation [57]

Les relations exprimées par l'Equation 11 et l'Equation 12 sont utilisées pour interpoler ou extrapoler dans le temps l'information acquise sur la dimension d'un panache ou d'un nuage et sur la concentration moyenne sur l'axe de l'écoulement. La concentration modélisée par un modèle gaussien doit être représentative d'une situation moyenne ou une « moyenne d'ensemble », qui correspond à la moyenne issue de différentes mesures réalisées sous des conditions externes similaires. Ce type de relation est parfois utilisé à tort pour estimer la décroissance des pics de concentrations alors que ces relations devraient être interprétées, de manière plus rigoureuse [58] comme la probabilité plus forte d'observer des forts écarts à la moyenne lorsque la durée d'échantillonnage diminue.

Wilson [59] rappelle les limitations liées à ces relations, largement basées sur des mesures des statistiques de vitesses turbulentes plutôt que sur des observations des élargissements de nuage, du fait notamment qu'elles ne tiennent pas compte de la dimension de la source et du temps de transfert (excepté pour l'Equation 12) qui sont deux paramètres importants.

En effet, un panache issu d'une source de grande dimension sera moins affecté par le *meandering* qu'un panache issu d'un même taux d'émission mais issu d'une source de petite dimension. Dans le cas d'un temps de transfert d'un nuage de l'ordre de la minute entre la source et le récepteur, une durée d'échantillonnage de 10 minutes va significativement augmenter la perception de la largeur du panache. A contrario, si le temps de transfert du nuage est de 100 min depuis la source jusqu'au récepteur, un temps additionnel sur la durée d'échantillonnage de 10 min aura peu d'effet sur le diagnostic de la largeur du panache. Bien que les limitations liées aux relations précédentes aient été reconnues depuis plusieurs dizaines d'années [59], il n'y a pas de modèles simples, de type formule analytique, permettant de prendre en compte l'ensemble de ces paramètres. Du fait de sa complexité, le modèle proposé par Wilson pour tenir compte de ces paramètres (taille de la source, temps de transfert) n'est pas adopté dans des outils opérationnels.

3 Convertir des informations météorologiques en classe de Pasquill

A titre d'information, rappelons qu'il existe une multitude de méthode pour convertir des informations météorologiques en classe de Pasquill, ci-dessous une liste non exhaustive de ces méthodes :

- au moyen du graphe proposé par [34] (cf. chapitre 4.3.2 du Yellow Book, TNO) en fonction du couple L, z_0 ; le choix de la longueur de rugosité est complexe et des confusions sont faites par ailleurs entre celle-ci et des paramètres de rugosité internes aux modèles de dispersions atmosphériques ;
- méthode dite "rayonnement - vent - nébulosité" qui utilise le rayonnement net le jour et la nébulosité la nuit ;
- méthode dite "gradient de température" qui nécessite la connaissance de la température à deux niveaux de hauteur différents afin de pouvoir calculer le gradient de température ;
- méthode dite "Ecart type de direction" qui repose sur la connaissance de l'écart type de la fluctuation de la direction du vent ;
- méthode dite "Gradient de température - Humidité" basée sur le gradient vertical de température et le taux d'humidité.

Annexe 3 :

Principales campagnes expérimentales utilisées dans les évaluations des modèles de dispersion atmosphérique de gaz toxiques/inflammables

Campagnes expérimentales	Burro	Coyote	Desert Tortoise	Goldfish	Handford	Maplin Sands	Prairie Grass	Thorney Island (instantané)	Thorney Island (continu)	MUST	Jack Rabbit
Substance	LNG	LNG	Ammoniac	Fluorure d'hydrogène	Krypton 85	LNG et LPG	SO ₂	Fréon et azote	Fréon et azote	C ₃ H ₆	Cl ₂
Type de rejet	Liquide à ébullition	Liquide à ébullition	diphasiques	Rejets diphasiques	Gazeux	Liquide à ébullition	Jet gazeux	Gazeux	Gazeux	Gazeux	gazeux, diphasiques
Nombre d'essais	8	3	4	3	5	4 et 8	44	9	2	63	9
Quantités en kg	10700 à 17300	6500 à 12700	10000 à 36800	3500 à 3800	11 à 24 Curies	LNG : 2000 à 6600 LPG : 1000 à 3800	23 à 63	3150 à 8700	4800	175 – 225 l/min	5000 à 20 000
Durée en s	79 à 190	65 à 98	126 à 381	125 à 360	598 à 1191	60 à 360	600	Instantané	460	Instantané et continu	36 à 291
Type de surface	Rejet sur des petites étendues d'eau	Rejet sur des petites étendues d'eau	Sable humide	Lit de lac desséché	Désert avec des buissons	Rejets avec des étendues d'eau peu profondes	Herbe	Herbe	Herbe	Désert	Désert
stabilité atmosphériques (Classes de Pasquill)	C-E	C-D	D-E	D	C-E	D	A-F	D-F	E-F	Très stable à neutre	C-D-E-F
Distance max. d'observation	140 - 800	300 - 400	800 ²⁵	3000	800	400 - 650	800	500 - 580	472		11 000

Tableau 15 : liste (non exhaustive) de campagnes expérimentales

²⁵Des concentrations ont été mesurées au-delà de 800 m, mais elles ont été peu instrumentées en arcs de mesures.

